

**Untersuchungen über die theoretischen Grundlagen
der Photoemission mit Hilfe der Vielkanalstreutheorie**

DISSERTATION

zur

**Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften**

der

Abteilung für Physik

und Astronomie

an der Ruhr-Universität Bochum

1979

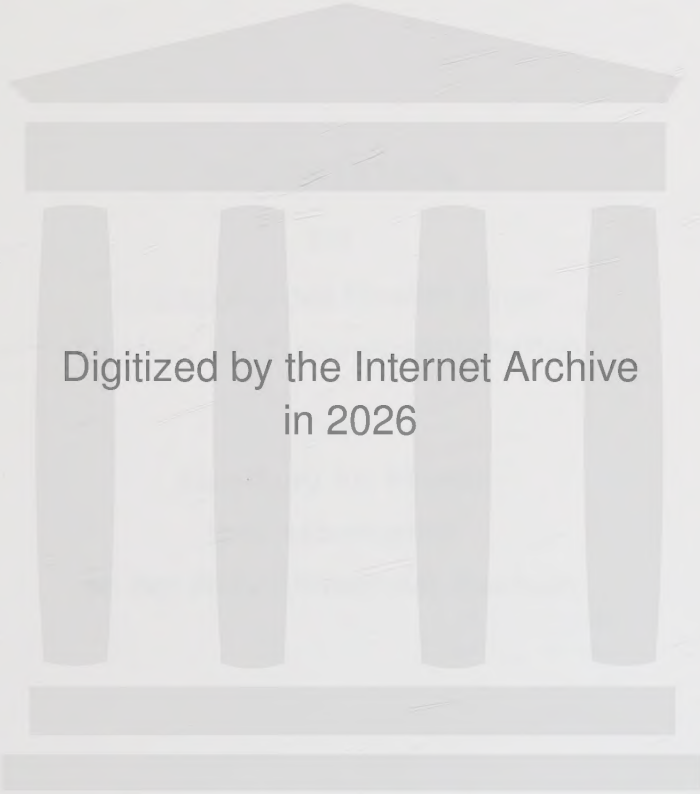
von

J.M. Joller

aus

Laupen /Schweiz

1978



Digitized by the Internet Archive
in 2026

**Untersuchungen über die theoretischen Grundlagen
der Photoemission mit Hilfe der Vielkanalstreuungstheorie**

DISSERTATION

zur

Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

der

Abteilung für Physik
und Astronomie

an der Ruhr-Universität Bochum

von

J.M. Joller

aus

Laupen /Schweiz

1978



Dissertation eingereicht am 20. 12. 1978
Tag der mündlichen Prüfung 31. 01. 1979
Referent Professor Dr. D. Wegner
Korreferent Professor Dr. H. Kümmel

Herrn Prof.Dr.D.Wagner danke ich,daß ich diese Arbeit am
Institut für Theoretische Physik III anfertigen konnte,sowie
für einige Diskussionen.

Inhalt

	Seite
Zusammenfassung	1
1. Einleitung	3
2. Responsetheorie der Photoemission	6
3. Streutheorie für zeitlich konstante Potentiale	12
a) Zeitabhängige Vielkanalstreutheorie	12
b) Zeitunabhängige Vielkanalstreutheorie	21
4. Vielkanalstreutheorie für zeitlich variable Potentiale	23
a) Zeitabhängige Vielkanalstreutheorie	23
b) Zeitunabhängige Vielkanalstreutheorie	41
5. Responsetheorie	46
a) Anknüpfung an Kapitel 2	46
b) Formulierung der Responsetheorie mit Hilfe der Mølleroperatoren	47
c) Äquivalenz von Response- und Streutheorie	51
6. Anwendung auf die Photoemission	57
a) Theoretische Bemerkungen zu $H(t)$, $U(r,s)$ und $\Omega(t_0)$	57
b) Born-Approximation: Photoemission als Streuung	61
c) Optik und Photoemission	74
d) Vergleich zu anderen Theorien	84
7. Schlußbemerkungen	85
Appendix A	87
Appendix B	89
Appendix C	91
Literatur	92

Zusammenfassung

Die Photoemission wurde im Rahmen einer nichtrelativistischen Vielkanalstreutheorie untersucht. Dabei wurde das elektromagnetische Potential als äußeres Potential betrachtet. Zur Durchführung dieser Theorie war es notwendig, die übliche Streutheorie auf dissipative Systeme zu verallgemeinern.

Die Photoemission läßt sich innerhalb dieses Schemas formal als Streuprozess an einem zeitlich variablen (äußeren) Potential beschreiben. Diese Methode erinnert an die Transformationen auf die verschiedenen Bezugssysteme, wie sie in der Hochenergiephysik häufig zur Beschreibung der Streuprozesse durchgeführt werden. Daß wir uns nicht der zweiten Quantisierung bedienten lag vor allem daran, daß die Grundlagen der Vielkanalstreutheorie im Rahmen der gewöhnlichen Quantenmechanik bereits eingehend untersucht worden sind, während nur sehr wenige Untersuchungen über dieselben Fragen innerhalb einer 2. quantisierten Theorie bekannt sind. Dadurch mußten wir auch das ganze Problem als Streuung an einem zeitlich variablen Potential betrachten und nicht als Streuung von Photonen an einem Target, denn das Strahlungsfeld wird ja nur in der 2. Quantisierung explizit mitbetrachtet, durch Angabe der Besetzungszahlen der Photonenzustände.

Die Rechnungen wurden zuerst in beliebiger Ordnung bezüglich der externen Störung durchgeführt, um einen Einblick in die allgemeine Struktur der Theorie zu erhalten. Um jedoch die Physik besser verstehen zu können, wurde die Born-Approximation detaillierter untersucht. Die allgemeinen Ergebnisse zeigen, daß die üblicherweise in der Streutheorie aufgezeigte Äquivalenz zwischen zeitabhängiger und zeitunabhängiger Formulierung sich nicht so einfach auf zeitlich variable Potentiale verallgemeinern läßt. Die hier entwickelten Methoden zeigen jedoch, wie man zu einem einheitlichen Bild der Streuprozesse, in zeitabhängiger und zeitunabhängiger Formulierung, für zeitlich variable oder konstante Potentiale gelangt.

Die Diskussion der physikalischen Prozesse in der Bornapproximation zeigt, daß die optische Absorption, die in der zweiten Quantisierung der 1. Photonenabsorption entspricht, und die optische Reflexion resp. Transmission durch zwei verschiedene Kopplungen zu Stande kommen (innerhalb der hier entwickelten nichtrelativistischen Theorie). Es wird gezeigt, daß ein Zusammenhang zwischen Transmission, Reflexion und einer 2-Photonenabsorption besteht. Bei der 2-Photonenabsorption gibt es allerdings 2 verschiedene Kopplungsmechanismen und der Zusammenhang mit der Reflexion und Transmission besteht nur für die eine Kopplung.

Als mögliche interessante, wenn auch in der Praxis außerordentlich schwierige Anwendung der Vielkanalformulierung, wird kurz auf die 2 Elektronenemission eingegangen. Bekanntlich ist die Zahl der sogenannten Sekundärelektronen im allgemeinen ein Vielfaches der Zahl der Primärelektronen. Deswegen erscheint es interessant zu untersuchen, welche zusätzliche Information, neben typischen Auger-Linien, man aus der Analyse der Sekundärelektronen gewinnen könnte.

1. Einleitung

In den vergangenen Jahren wurden bedeutende Fortschritte sowohl auf der theoretischen als auch auf der experimentellen Seite auf dem Gebiet der Photoemission bei Atomen und Kristallen erzielt (Amusia [1975], Wendin [1975], Schaich [1971], Mahan [1970], Feuerbacher et al [1976]). Diese Erfolge legten es nahe, die theoretischen Grundlagen der Theorie etwas genauer zu untersuchen und eventuelle Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Theorien herzustellen. Weil die theoretischen Grundlagen der Vielkanalstreutheorie in zweiter Quantisierung noch sehr unvollständig sind, während es sehr viele Untersuchungen über diese Grundlagen im Rahmen der gewöhnlichen Quantenmechanik gibt, entschieden wir uns dafür, die Theorie nicht in der 2. quantisierten Form zu untersuchen. Abgesehen davon müßte man die Streuung von Masse Null Teilchen (Photonen) erst untersuchen bevor man die Photoemission als inelastische Streuung eines Photons beschreiben wollte (und sich Gedanken macht über eher formale Gesichtspunkte der Theorie).

Bei Photoemissionsexperimenten interessiert man sich primär für die emittierten Elektronen, die die Emission verursachende elektromagnetische Strahlung interessiert nur indirekt (als Energiequelle). Deshalb wollen wir das Strahlungsfeld als äußere Störung betrachten, d.h. wir interessieren uns nicht für die Ströme und Ladungsverteilungen, die dieses Feld erzeugen, sondern nur für die Wirkung des äußeren, zeitlich und räumlich variablen Potentials auf das Elektronensystem, welches wir nichtrelativistisch beschreiben. Durch diese Näherung sind wir allerdings gezwungen Systeme zu betrachten, die durch einen zeitlich variablen Hamiltonoperator beschrieben werden müssen. Deswegen mußten wir zuerst die gewöhnliche Vielkanalstreutheorie auf dissipative Systeme verallgemeinern. Diese Untersuchung erwies sich allerdings als sehr wertvoll im Zusammenhang mit der Frage nach der Äquivalenz von Streu- und Resonanztheorie.

In Kapitel 2 skizzieren wir den bekannten Zugang zum Problem der Photoemission mit Hilfe der Responsetheorie und erklären anhand des allgemeinen Ausdrucks für den Photostrom, wieso eine Formulierung mit Hilfe der Vielkanalstreutheorie nahe liegt.

In Kapitel 3 wird eine Einführung in die Streutheorie gegeben. Dabei geht es nicht um die Erarbeitung bekannter Ergebnisse, sondern vielmehr um grundlegende Ideen und die Definition der relevanten Begriffe und Größen. Dabei wird nach einigen kurzen Bemerkungen zum Problem der Zeitentwicklung in der Quantenmechanik die zeitabhängige Theorie der Streuung (Abschnitt a)) behandelt. Im Abschnitt b) gehen wir kurz auf den zeitunabhängigen Zugang zur Streutheorie ein.

Für die hier untersuchten Systeme reicht der, im wesentlichen auf J.M. Jauch [1958] zurückgehende zeitabhängige Formalismus aus. In Kapitel 4 gehen wir trotzdem erst kurz auf die Lösung der Schrödinger Gleichung bei Anwesenheit einer zeitlich variablen äußeren Störung ein (Abschnitt a)) und entwickeln die zu solchen Systemen gehörende zeitabhängige Streutheorie, analog der in Kapitel 3 dargestellten Theorie. Die Beschreibung der Streuung innerhalb eines zeitunabhängigen Formalismus weicht jedoch völlig von dem in Kapitel 3 Abschnitt b) diskutierten ab. Es wird jedoch gezeigt (Abschnitt b)), daß man die Ergebnisse für konservative Systeme zwangslos erhalten kann.

Da eine der Zielsetzungen der Untersuchungen war, eventuell bestehende grundsätzliche Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Formulierungen (Response- und Streutheorie) zu finden, die natürlich modellunabhängig sein sollten, geben wir in Kapitel 5 eine Formulierung der Responsetheorie an, die die übliche Schwierigkeit mit dem $\lim_{t \rightarrow +\infty}$ mit Hilfe der Ergebnisse aus Kapitel 4 löst.

Das Kapitel 6 enthält physikalische Diskussionen der hier entwickelten Theorie der Photoemission für eine bestimmte Klasse von Modellsystemen. Da die Physik im Vordergrund stehen soll, gehen wir nur sehr kurz auf rein theoretische Fragen ein (Abschnitt a)). In Abschnitt b) diskutieren wir die hinter dem Formalismus steckende Physik in Born-Approximation. Auch auf die interessante Frage nach einem Zusammenhang zwischen den Reflexions-, Transmissions- und Absorptionsprozessen wird in diesem Kapitel untersucht (Abschnitt c)). Eine Diskussion der Mehrteilchenemission (Abschnitt b)), die sich innerhalb der Vielkanalstreuung besonders leicht formulieren läßt, zeigt, daß gerade auf diesem Gebiet viele interessante Ergebnisse erhalten werden könnten, falls man die schwierigen Experimente (Koinzidenzmessungen) dazu durchführen könnte. Kapitel 6 wird abgeschlossen mit einigen Bemerkungen zu einigen anderen bestehenden Formulierungen des Problems der Photoemission.

2. Resonsetheorie der Photoemission

Wir beginnen mit dem von Schaich [1971] zum erstenmal in der Festkörperphysik verwendeten Zugang zur Theorie der Photoemission, bei dem man auf Grund der experimentellen Tatsache, daß der Photostrom über einen weiten Energiebereich proportional zur Intensität des einfallenden Lichtes ist, den Stromerwartungswert bis und mit zweiter Ordnung in $\vec{A}^{\text{ext}}$ berechnet:

Betrachten wir dazu ein System von Ionen (Masse M_i) an den Orten $\vec{R}_i$ mit Impulsen $\vec{P}_i$, und Elektronen (Masse m , Impuls $\vec{p}_j$, Ort $\vec{r}_j$) im Felde einer äußeren Störung $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t)$.

Da die Masse der Ionen ein Vielfaches der Elektronen beträgt, kann man die Kopplung der Ionen an $\vec{A}^{\text{ext}}$ im allgemeinen vernachlässigen.

Wir können dann unser Modellsystem beschreiben durch:

$$(2.1) \quad H(t) = \frac{1}{2m} \sum_i (\vec{p}_i - e/c \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{r}_i, t))^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \\ + \sum_j \frac{1}{2M_j} \vec{P}_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,k} V(\vec{R}_j - \vec{R}_k) + \sum_{j,k} U(\vec{r}_j - \vec{R}_k)$$

wobei V die Wechselwirkung der Ionen und U die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ionen beschreibt. Die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen wurde explizit hingeschrieben. $H(t)$ läßt sich schreiben als Summe von 3 verschiedenen Anteilen:

$$(2.2) \quad H(t) = H_0 + H_1 + H_2$$

mit

$$(2.3) \quad H_0 = \frac{1}{2m} \sum_i \vec{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_j \frac{\vec{P}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{j,k} W(\vec{R}_j, \vec{R}_k) \\ + \sum_{j,k} U(\vec{r}_j, \vec{R}_k) \quad \text{dem Hamiltonoperator}$$

des ungestörten Systems, sowie

$$(2.4) \quad H_1 = - \frac{e}{2mc} \sum_i (\vec{p}_i \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) + \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \vec{p}_i)$$

dem paramagnetischen Anteil der elektromagnetischen Wechselwirkung sowie schließlich:

$$(2.5) \quad H_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)^2$$

dem diamagnetischen Anteil.

Der übliche Zugang zur Resonanztheorie wie er in den Standardreferenzen (L. Hedin, S. Lundquist [1969], H. Ehrenreich [1966]) dargestellt wird, verläuft folgendermaßen:

man startet mit der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung (wobei wir im Folgenden für $H_1 + H_2 = H^{\text{ext}}(t)$ schreiben werden):

$$(2.6) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \psi_s(t) = (H_0 + H^{\text{ext}}(t)) \psi_s(t)$$

(der Index s steht für Schrödingerbild).

Dann setzt man voraus, daß

$$(2.7) \quad H^{\text{ext}}(t) = 0 \quad \text{für } t < t_0$$

so daß man für $t < t_0$ ein konservatives System hat.

Jetzt geht man in die Wechselwirkungsdarstellung

$$(2.8) \quad \psi_I(t) = U_0^{-1}(t - t_0) \psi_s(t)$$

$$(2.9) \quad H_I^{\text{ext}}(t) = U_0^{-1}(t - t_0) H^{\text{ext}}(t) U_0(t - t_0)$$

Man erhält dann als Lösung der Wellengleichung

$$(2.10) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \psi_I(t) = H_I^{\text{ext}}(t) \psi_I(t) \quad (\hbar = 1)$$

die Dysonreihe

$$(2.11) \quad \psi_I(t) = \psi_I(t_0) - i \int_{t_0}^+ ds H_I^{\text{ext}}(s) \psi_I(s)$$

(es gilt $\psi(t_0) = \psi_I(t_0) = \psi_s(t_0)$)

ψ_I läßt sich damit auch schreiben als

$$(2.12) \quad \psi_I(t) = T \exp \left\{ -i \int_{t_0}^+ ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \psi(t_0)$$

Soweit läßt sich die Theorie formal korrekt formulieren.

Jetzt beginnt allerdings die altbekannte Schwierigkeit:

Um von Gleichung (2.12) zur Resonsetheorie zu gelangen, wie sie z.B. in den oben zitierten Referenzen dargestellt wird, läßt man t_0 gegen $-\infty$ streben. Die Schwierigkeit, die dabei auftaucht ist jedoch folgende:

wenn man überall $t_0 \rightarrow -\infty$ streben ließe, so bekäme man den unsinnigen Ausdruck

$$\begin{aligned}
 (2.13) \quad \psi_I(t) &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} T \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \psi(t_0) \\
 &= T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \psi(t_0) \quad (\text{falls beide Lim existieren}) \\
 &= T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \psi(-\infty)
 \end{aligned}$$

Der Ausdruck ist unsinnig, weil $\psi(-\infty)$ nicht definiert ist:

$\psi(-\infty) = e^{i\infty H} \psi(0)$. Um zum Ausgangspunkt der Resonsetheorie zu gelangen, muß man nun $\psi(-\infty)$ durch $\chi(0)$ ersetzen, wobei χ eine Lösung des ungestörten Systems ist (beschrieben durch H_0).

Man sieht, daß hier die übliche Einführung eines Einschaltfaktors $e^{-\epsilon \tau}$ nicht bringt, da er nur die Wechselwirkung $H^{\text{ext}}(-)$ einschaltet, d.h. der Einschaltfaktor wirkt sich zwar auf den Faktor vor ψ aus, jedoch nicht direkt auf ψ . (Würde man auch noch zu H_0 einen Imaginärteil hinzuaddieren, so würde $\psi(t)$ exponentiell gegen Null gehen.)

Wir sehen aus diesen Bemerkungen, daß man offensichtlich den limes $t_0 \rightarrow -\infty$ etwas vorsichtiger behandeln muß. Das Verhalten quantenmechanischer Systeme für große positive und negative Zeiten wird sehr eingehend im Rahmen der Streutheorie untersucht. Deshalb werden wir uns im Anschluß an die Streutheorie (Kapitel 4) nochmals der Resonsetheorie zuwenden und eine saubere Formulierung angeben. Hier geht es jetzt nur darum zu zeigen, welche Schwierigkeiten beim Endausdruck für den

Photostrom die Behandlung mit Hilfe der Streutheorie nahelegte. Deswegen starten wir hier mit dem Ausdruck

$$(2.14) \quad \psi_I(t) = T \exp \left\{ -i \int_0^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \chi(0)$$

und verweisen auf eine strenge Rechtfertigung des Überganges von (2.12) zu (2.14) auf Kapitel 5. In der Literatur wird diese Rechtfertigung nicht erbracht, obschon sich wohl die meisten Autoren der Schwierigkeiten bewußt sind.

Als experimentell relevante Größe kann man den äußeren Photostrom bezeichnen. Der Stromerwartungswert ist gegeben durch:

$$(2.15) \quad \langle J_\mu(\vec{R}, t) \rangle = \text{Spur} \{ e^{\beta H_0} J_\mu(\vec{R}, t) \} \\ = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z_0} \langle n, t | J_\mu(\vec{R}, t) | n, t \rangle$$

mit

$$(2.16) \quad |n, t\rangle = T \exp \left\{ -i \int_0^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} |n, t=0\rangle$$

dem gestörten Zustand, $|n, t\rangle$ mit

$$(2.17) \quad H_0 |n, t=0\rangle = E_n^0 |n, t=0\rangle = E_n^0 |n\rangle$$

dem ungestörten Problem, Z_0 der Zustandssumme (zu H_0) und

$$(2.18) \quad J_\mu(\vec{R}, t) = U_0^{-1}(t) J_\mu(\vec{R}) U_0(t)$$

der Stromoperator (Index I = Wechselwirkungsbild).

Nun entwickelt man bis und mit 2. Ordnung in $\vec{A}^{\text{ext}}$, d.h. man berücksichtigt H_2 in erster und H_1 in 2. Ordnung:

$$(2.19) \quad |n, t\rangle_{\vec{A}^{\text{ext}}} = |n\rangle - i \int_0^t ds H_I^{\text{ext}}(s) |n\rangle + (-i)^2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 H_I^{\text{ext}}(s_1) H_I^{\text{ext}}(s_2) |n\rangle$$

liefert 2 Terme zweiter Ordnung:

$$(2.20) \quad -i \int_0^t ds H_{1I}^{\text{ext}}(s) |n\rangle \quad \text{sowie} \quad (-i)^2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 H_{1I}^{\text{ext}}(s_1) H_{1I}^{\text{ext}}(s_2) |n\rangle$$

einen Term 1. Ordnung:

$$(2.21) \quad -i \int_0^t ds H_{1I}^{\text{ext}}(s) |n\rangle$$

sowie den ungestörten Anteil: $|n\rangle$

Schaich [1971] bemerkt nun, daß die Zustände $|n\rangle$ im allgemeinen für $\vec{R} \rightarrow \infty$ exponentiell gegen Null gehen werden. Deswegen liefern alle Terme, bei denen $j_n^q(\vec{R}, t)$ nicht von beiden Seiten mit einem Term proportional zu $\vec{A}^{\text{ext}}$ multipliziert wird, keinen Beitrag zum externen Photostrom:

$$\begin{aligned}
 (2.22) \quad \langle J_n(\vec{R}, t) \rangle &= Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | J_{nI}(\vec{R}, t) | n \rangle \\
 &\quad - i Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | J_{nI}(\vec{R}, t) \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) | n \rangle \\
 &\quad + i Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) J_{nI}(\vec{R}, t) | n \rangle \\
 &\quad + (-i)(+i) Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | \int_{-\infty}^t ds_1 H_I^{\text{ext}}(s_1) J_{nI}(\vec{R}, t) \int_{-\infty}^t ds_2 H_I^{\text{ext}}(s_2) | n \rangle \\
 &\quad + (-i)^2 Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | J_{nI}(\vec{R}, t) \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 H_I^{\text{ext}}(s_1) H_I^{\text{ext}}(s_2) | n \rangle \\
 &\quad + (+i)^2 Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 H_I^{\text{ext}}(s_1) H_I^{\text{ext}}(s_2) J_{nI}(\vec{R}, t) | n \rangle
 \end{aligned}$$

$$\langle n | J_{nI}(\vec{R}) | n \rangle = \frac{e\hbar}{2m_i} \{ \chi_n^*(\vec{R}) \text{grad} \chi_n(\vec{R}) - \text{grad} \chi_n^*(\vec{R}) \cdot \chi_n(\vec{R}) \}$$

im Falle von Einteilchenwellenfunktionen $|n\rangle$.

Die 3 ersten Terme sowie die zwei letzten Terme liefern somit keinen Beitrag zum externen Photostrom. Den 4. Term schauen wir uns noch etwas genauer an:

$$(2.23) \quad Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | \int_{-\infty}^t ds_1 \{ H_I^{\text{ext}}(s_1) + H_I^{\text{ext}}(s_1) \} J_{nI}(\vec{R}, t) \int_{-\infty}^t ds_2 \{ H_I^{\text{ext}}(s_2) + H_I^{\text{ext}}(s_2) \} | n \rangle$$

In zweiter Ordnung in $\vec{A}^{\text{ext}}$ erhält man nur einen Beitrag von

$$(2.24) \quad Z_n e^{-\beta E_n^0} \frac{1}{Z_n} \langle n | \int_{-\infty}^t ds_1 H_I^{\text{ext}}(s_1) J_{nI}(\vec{R}, t) \int_{-\infty}^t ds_2 H_I^{\text{ext}}(s_2) | n \rangle$$

da die weiteren Terme entweder höherer Ordnung sind:

$$\begin{array}{lll}
 H_{nI}^{\text{ext}} J_{nI} H_{2I}^{\text{ext}} & \text{und} & H_{2I}^{\text{ext}} J_{nI} H_{1I}^{\text{ext}} \quad \text{sind dritter} \\
 H_{2I}^{\text{ext}} J_{nI} H_{2I}^{\text{ext}} & \text{sogar} & 4. \text{ Ordnung in } \vec{A}^{\text{ext}}.
 \end{array}$$

Schreibt man für $H_t^{\text{ext}}(t) = -\frac{1}{c} \int d^3r \, j^P(\vec{r}) \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{r}, t)$, so erhält man schließlich die Grundformel von Schaich:

$$\begin{aligned}
 (2.25) \quad \langle J_\alpha(\vec{R}, t) \rangle_{(2)}^{\text{ext}} &= \left(\frac{1}{\hbar c} \right)^2 \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \sum_n e^{-\beta E_n} \\
 &\quad \times \langle n | (j^P \vec{A}^{\text{ext}})_I(s_1) J_\alpha(\vec{R}, t)_I (j^P \vec{A}^{\text{ext}})_I(s_2) | n \rangle \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar c} \right)^2 \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \langle \langle (j^P \vec{A}^{\text{ext}})_I(s_1) J_\alpha(\vec{R}, t)_I (j^P \vec{A}^{\text{ext}})_I(s_2) \rangle \rangle \\
 &\quad \text{wobei } \langle \langle \sigma \rangle \rangle = \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \sigma | n \rangle \text{ der therm. Mittelwert ist.}
 \end{aligned}$$

Wie man sieht, ist man gezwungen die 3-Stromkorrelationsfunktion zu diskutieren. Dies erweist sich als außerordentlich schwierig und ist bis heute nur für speziell einfache Fälle gelungen (Schaich [1971]).

Es fällt aber sofort auf, daß der Stromoperator in der Mitte ein Ortsargument trägt, welches weit außerhalb der Probe ist. Man kann sich deswegen die Frage stellen, ob nicht diese Tatsache benützt werden könnte, um die Formel aufzubrechen. Dazu braucht man jedoch eine Untersuchung über die möglichen Formen der Zustände die man eventuell einschieben möchte:

$$(2.26) \quad \langle \langle j_I^P J_I j_I^P \rangle \rangle = \sum_{u,v} \langle \langle j_I^P | u \rangle \langle u | J_I(\vec{R}, t) | v \rangle \langle v | j_I^P \rangle \rangle$$

und Aussagen über die Form solcher Zustände macht man gerade in der Streutheorie. Betrachtet man (2.26), so könnte man vermuten, daß $\sum_v |v\rangle \langle v| j_I^P \vec{A}^{\text{ext}} |u\rangle$ ein Streuzustand darstellt und zwar den Zustand $|u\rangle$ nach der Streuung am Potential $j_I^P \vec{A}^{\text{ext}}$, analog zur L-S-Gleichung $\hat{A} |u\rangle$. Das Potential $\vec{A}^{\text{ext}}$ ist jedoch zeitlich variabel. Deswegen müssen wir uns zuerst mit Systemen und Streuprozessen beschäftigen, die zeitlich variable Potentiale enthalten.

3. Streutheorie für zeitlich konstante Potentiale

In diesem Kapitel geht es darum, die grundlegenden Ideen der Vielkanalstreutheorie zu erläutern. Ohne Verlust an Allgemeinheit können wir uns dabei auf möglichst einfache Systeme beschränken, da es im wesentlichen nur darum geht, die relevanten Größen einzuführen und zu definieren. Das Kapitel dient zugleich als Grundlage für die im folgenden Kapitel zu entwickelnde Streutheorie an zeitlich variablen Potentialen, bei der die Zeitabhängigkeit der Potentiale wichtige Veränderungen des Formalismus bewirkt.

a) Zeitabhängige Vielkanalstreutheorie

Bei der zeitabhängigen Formulierung der Streutheorie geht es darum, ausgehend von der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, den Streuprozess in seinem zeitlichen Verhalten zu beschreiben.

In der Vielkanaltheorie, die man typischerweise bei Mehrteilchensystemen anwenden kann, kann man neben elastischen Streuprozessen auch Reaktionen beschreiben. Wir werden weiter unten ein einfaches Beispiel eines sogenannten 'break up' Prozesses beschreiben, um daran die relevanten Größen zu erklären.

Um den Formalismus nicht zu stark zu strapazieren, wollen wir uns im Folgenden auf Modellsysteme beschränken, die sich mit Hilfe eines Schrödingeroperators von folgender einfacher Form beschreiben lassen:

$$(3.1) \quad H_N = H_0 + V = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V(x) = H_0 + V(x) ; \quad x \in \mathbb{R}^{3N}$$

mit

$$(3.2) \quad H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}$$

dem ungestörten Hamiltonoperator und

$$(3.3) \quad V(x) = \sum_{i,j} V_{ij}(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$$

dem Wechselwirkungspotential.

Wir können natürlich nicht erwarten, daß wir eine Theorie angeben können, die für beliebige Potentiale funktioniert. Deswegen wollen wir uns auf möglichst einfache Systeme beschränken und z.B. verlangen, daß

$$(3.4) \quad \int d^3x_{ij} |V_{ij}(\vec{x}_{ij})|^2 < \infty$$

Wie man sofort erkennt, haben wir dadurch ein für die Physik wichtiges Potential, das Coulomb-Potential, ausgeschlossen. Der Grund dafür ist der, daß das Coulomb-Potential typische Schwierigkeiten hat, die hier aber nicht interessieren. Wir interessieren uns hier nicht für eine möglichst allgemeine Lösung des Problems. Es geht uns hier wesentlich nur um die Einführung der relevanten Begriffe und Methoden.

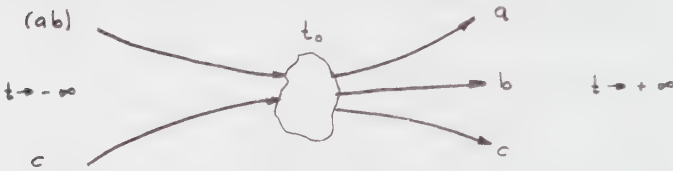
Besonders zu erwähnen ist die Tatsache, daß man allgemein in der Vielkanalstreutheorie die Teilchen als unterscheidbar betrachtet. Eine den Teilchen entsprechende (Anti-)Symmetrisierung könnte ohne besondere Schwierigkeiten durchgeführt werden, doch trägt dies nichts wesentlich Neues zum Verständnis der zu Grunde liegenden Strukturen bei (Taylor [1972]).

Mit Hilfe von H^+ (Glg. (3.1)) wird nun das System voll beschrieben. Bei einem Streuprozess interessiert man sich jedoch für spezielle Anfangs(=in)- und End-(=out)-Konfigurationen, bei denen die die Streuung verursachenden Potentiale fehlen. Ein sehr einfaches Beispiel kann dies bereits verdeutlichen. Um die in einer Vielkanaltheorie typischen Größen erklären zu können, behandeln wir eine einfache Reaktion:

$$(ab) + c \rightarrow a + b + c$$

(ab) bedeutet dabei, daß die Teilchen a und b gebunden sind. Ein drittes Teilchen c (eventuell ein zusammengesetztes) wird auf (ab) geschossen und bewirkt die 'break up' Reaktion.

Schematisch sieht der Streuprozess wie folgt aus:



Zustand $\chi_\alpha = \chi_{in}$

Hamiltonoperator H_α

Energie E_α

Zustand ψ_α

Hamiltonoperator H

$H = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta$

Zustand $\chi_\beta = \chi_{out}$

Hamiltonoperator H_β

Energie E_β

Zur Beschreibung einer solchen Vielkanalstreuung benötigen wir einige Definitionen.

Definition der Kanäle:

Wir unterscheiden hier in unüblicher Weise zwischen Fragment- und Streukanälen:

unter einem Fragmentkanal wollen wir einfach ein System verstehen, bestehend aus einer charakteristischen Clusterung der N-Teilchen in Teilfragmente. Jedes Teilfragment C_k läßt sich durch einen ganz bestimmten Hamiltonoperator H_{C_k} beschreiben. Wir legen jedoch die innere Energie von C_k noch nicht fest. Die Differenz $H - H_\alpha = V_\alpha$, mit $H_\alpha = \sum_k H_{C_k} + \frac{p^2}{2M_{Total}}$ (Summe über die Fragmente + kinetische Energie des Gesamtsystems, bestehend aus den verschiedenen Clustern), bezeichnet man als Kanalwechselwirkung. V_α fehlt in dem asymptotischen Bereich.

Als Spezialisierung des Fragmentkanals definieren wir den Streukanal. Er besteht aus einem bestimmten Fragmentkanal, wie er eben definiert wurde. Zudem wird aber eine Aussage über die inneren Energien der Fragmente gemacht. D.h. ein Streukanal wird durch einen bestimmten Satz von Energien $\{E_{C_k}\}$ beschrieben (+ kinetische Energie des Gesamtsystems).

Wir können also sagen, daß ein Fragmentkanal aus vielen verschiedenen Streukanälen besteht. Eine Klassifizierung mittels Streukanälen ist entsprechend spezifischer als jene mit Hilfe der Fragmentkanäle. Falls H_{C_k} zeitabhängig ist, wie es im folgenden Kapitel vorkommen kann, kann man zwar noch Fragmentkanäle definieren, aber da die Energie E_{C_k} kein Eigenwert von H_{C_k} ist, kann man keinen spezifischen Streukanal mehr angeben.

In unserem Beispiel bilden die verschiedenen gebundenen Zustände $(ab)_n$ je einen Streukanal: zu $(ab)_n$ gehört E_n^{ab} . Das System (ab) läßt sich jedoch durch einen einzigen Hamiltonoperator H_{ab} beschreiben; (ab) ist also ein einziger Fragmentkanal. Üblich ist eine Klassifizierung mit Hilfe von Streukanälen, aber die Definition der Fragmentkanäle wird sich als zweckmäßig erweisen.

Bei theoretischen Betrachtungen zur zeitabhängigen Streutheorie geht es meistens um folgende theoretischen Fragen:

- 1) Ist der Hamiltonoperator selbstadjungiert?
- 2) Existiert die Zeitentwicklung für das asymptotische und das volle System?
- 3) Ist der Mølleroperator $\Omega_\alpha(t)$ in irgendeiner Art und Weise sauber definierbar?

Uns geht es hier nicht um eine Beantwortung dieser Fragen. Wir wollen jedoch erwähnen, daß unter der Voraussetzung (3.4) H und H_α resp. H_β selbstadjungiert sind (Kato [1966]). Selbstverständlich kommutiert H mit sich selbst:

$$(3.5) \quad [H, H] = 0 \quad ; \quad [H_\alpha, H_\alpha] = 0 \quad ; \quad [H_\beta, H_\beta] = 0$$

Dies erwähnen wir hier nur explizit, weil die Hamiltonoperatoren, die wir im folgenden Kapitel und insbesondere in der Photoemission betrachten, wegen der Zeitabhängigkeit der Potentiale nicht mehr kommutieren.

Wenn wir unser einfaches Beispiel betrachten, so erkennen wir, daß für sehr große positive und negative Zeiten die Bewegung des Gesamtsystems vergleichbar ist mit der Bewegung eines Systems wechselwirkungsfreier Cluster (=Fragmente) a, b und c im out-Kanal resp. (ab) und c im in-Kanal.

Jeder Cluster läßt sich durch seine Schwerpunktbewegung und seine Relativbewegung beschreiben, d.h. besteht der Fragmentkanal α aus k Clustern, so läßt er sich beschreiben durch

$$(3.6) \quad H_{\alpha} = \sum_i^k \frac{p_i^2}{2M_i} + \sum_{i,j}^k H_{rel}^{(i,j)} = H_{cm} \otimes 1 + 1 \otimes H_{rel}^{(1)} \otimes 1 + \dots + 1 \otimes \dots \otimes H_{rel}^{(k)} \\ = H - V_{\alpha}$$

(M_i = Masse des Clusters i), auf dem Hilbertraum

$$(3.7) \quad \mathcal{H}_{\alpha} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \bigotimes_{i=1}^k \mathcal{H}_{rel}^{(i)}$$

Physikalisch besagt Gleichung (3.6), daß wir uns für die Frage interessieren, ob sich unser System für große Zeiten wie freie zusammengesetzte Teilchen bewegen, die am Potential V_{α} gestreut werden resp. wurden. V_{α} ist dabei die Kanalwechselwirkung.

Wollen wir einen speziellen Streukanal beschreiben, so brauchen wir nur überall $H_{rel}^{(i)} = :H_{\alpha}^{(i)}$ durch $E_{\alpha}^{(i)}$ zu ersetzen. Die Cluster werden somit wie zusammengesetzte Teilchen mit einer festen inneren Energie $E_{\alpha}^{(i)}$ betrachtet. (Dies ist das in der Vielkanalstreutheorie übliche Verfahren (Taylor [1972])). Zu einem best. Streukanal gehört nach der angegebenen Definition ein Unterraum von $\mathcal{H}_{\alpha}$, nämlich:

$$(3.8) \quad \mathcal{H}_{\alpha}^{streu} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \bigotimes_{i=1}^k \mathcal{P}_{\alpha i}$$

$\mathcal{P}_{\alpha i}$ beschreibt die inneren Zustände der Cluster. Falls ein Cluster nur aus einem Teilchen besteht, ersetzt man einfach $\mathcal{P}_{\alpha i}$ durch 1.

Da wir den Streuprozess in seinem zeitlichen Verlauf verstehen wollen, brauchen wir bestimmte Aussagen über die Zeitentwicklung des wechselwirkenden, sowie des asymptotisch mit dem wechselwirkenden zu vergleichenden System: H_α resp. H_β .

Da das Clustersystem (H_α resp. H_β) wechselwirkungsfreie zusammengesetzte Teilchen beschreibt, zerfällt asymptotisch die Zeitentwicklung $U_\alpha = e^{-i H_\alpha t}$ gemäß

$$(3.9) \quad U_\alpha(t) = e^{-i H_\alpha t} = U_{\alpha CM}(t) \bigotimes_{i=1}^k U_\alpha^{(i)}(t)$$

wobei

$$(3.10) \quad U_{\alpha CM}(t)$$

die Schwerpunktbewegung des Gesamtsystems und

$$(3.11) \quad U_\alpha^{(i)}(t) = e^{-i H_\alpha^{(i)} t} \quad (H_\alpha^{(i)} = H_{\alpha_i}^{(i)})$$

die Relativbewegung des i-ten Fragments beschreibt.

Daß diese Zeitentwicklung auch im mathematisch strengen Sinne definiert ist, folgt aus dem Stone'schen Theorem, wegen der Selbstadjungiertheit von H resp. $H_{\alpha CM}$ resp. $H_\alpha^{(i)}$ (siehe z.B. J.M. Jauch [1968]).

Zu einer Zeitentwicklung für einen speziellen Streukanal gelangen wir, indem wir überall $H_\alpha^{(i)}$ durch $E_\alpha^{(i)}$ ersetzen:

$$(3.12) \quad U_\alpha^{stet}(t) = e^{-i H_{\alpha CM} t} \bigotimes_{i=1}^k e^{-i E_\alpha^{(i)} t}$$

Betrachten wir nun den zeitlichen Verlauf des Streuprozesses, so gelangen wir zur Definition der Mølleroperatoren (siehe z.B. Taylor [1972]). Man geht davon aus, daß für große Zeiten sich die einzelnen Fragmente unabhängig voneinander bewegen. Es erscheint deshalb sinnvoll, die Bewegung des Gesamtsystems für große positive und negative Zeiten mit der Bewegung eines geclusterten Systems zu vergleichen, d.h. $\Psi(t)$ mit $\chi_\alpha(t)$, wobei sich χ_α zeitlich mit $U_\alpha(t)$ entwickelt:

$$(3.13) \quad \chi_\alpha(t) = U_\alpha(t-t_0) \chi_\alpha(t_0)$$

Die Fragmentierung α (d.h. die Wahl von H_α) passen wir dabei den experimentellen Befunden an: wählen wir eine Fragmentierung γ die experimentell nie realisiert wird, werden wir bei der praktischen Berechnung feststellen, daß $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, d.h. der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $\alpha \rightarrow \gamma$, zumindest sehr klein ist.

Die physikalisch anschauliche Asymptotenbedingung läßt sich präzisieren durch die Forderung:

$$(3.14) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| U(t-s) \psi(s) - U_\alpha(t-s) \chi_\alpha(s) \| = 0$$

(mit $\| f \|^2 = \int d^3x f(x) f^*(x)$).

Für endliche Zeiten t können wir den Ausdruck umformen in

$$(3.15) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| U(t-s) \{ \psi(s) - \tilde{U}^\dagger(t-s) U_\alpha(t-s) \chi_\alpha(s) \} \| =$$

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| \psi(s) - \Omega_{\alpha\mp}(t,s) \chi_\alpha(s) \| = 0$$

da U unitär ist. Der limes des Operators $\Omega_{\alpha\pm}(t,s)$ ist definiert als Møller-Operator:

$$(3.16) \quad \Omega_{\alpha\mp}(s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Omega_{\alpha\mp}(t,s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}^\dagger(t-s) U_\alpha(t-s)$$

(s-lim bedeutet: starker limes d.h. limes im Sinne von Glg.

(3.15)). Wichtig ist, daß $\Omega_{\alpha\pm}(s)$ nicht vom Referenzzeitpunkt s abhängt:

$$(3.17) \quad \Omega_{\alpha\pm}(s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}^\dagger(t-s) U_\alpha(t-s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}^\dagger(t-r-s-r) U_\alpha(t-r-s-r)$$

$$= s\text{-}\lim_{t' \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}^\dagger(t'-s') U_\alpha(t'-s') \quad \text{mit } t' = t-r, s' = s-r$$

$$= \Omega_{\alpha\pm}(s')$$

denn wir werden später sehen, daß daraus sich schließlich ergibt, daß der Energieerwartungswert im in-Kanal ($\langle \alpha / H_\alpha / \alpha \rangle$) gleich dem Energieerwartungswert im out-Kanal ($\langle \beta / H_\beta / \beta \rangle$) ist (d.h. die Energieerhaltung).

Um die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}$ zu beweisen, d.h. die Existenz des limes $t \rightarrow \pm\infty$ geht man in der Streutheorie üblicherweise wie folgt vor: man differenziert nach der Zeit und integriert wieder. Dadurch tritt das Wechselwirkungspotential explizit in Erscheinung:

$$\begin{aligned} (3.18) \quad \Omega_{\alpha+}(s) - 1 &= - \int_{-\infty}^s \left(\frac{d}{dt} \Omega_{\alpha+}(t,s) \right) dt = - \int_{-\infty}^s dt \frac{d}{dt} [\tilde{U}'(t-s) U_{\alpha}(t-s)] \\ &= - \int_{-\infty}^s dt \{ \tilde{U}'(t-s) (iH) U_{\alpha}(t-s) - \tilde{U}'(t-s) (iH_{\alpha}) U_{\alpha}(t-s) \} \\ &= -i \int_{-\infty}^s dt \tilde{U}'(t-s) (H - H_{\alpha}) U_{\alpha}(t-s) \\ &= -i \int_{-\infty}^s dt \tilde{U}'(t-s) V_{\alpha} U_{\alpha}(t-s) \end{aligned}$$

Geht man zur Norm über ($s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty}$) und benützt die Dreiecks^{un}vergleichung

$$(3.19) \quad \|\Omega_{\alpha+}(s) \chi_{\alpha}(s)\| \leq \|\chi_{\alpha}(s)\| + \int_{-\infty}^s dt \|V_{\alpha} U_{\alpha}(t-s) \chi_{\alpha}(s)\|$$

(wobei auch noch die Unitarität von $U(t-s)$ ausgenützt wurde), so sieht man, daß man die Endlichkeit des Zeitintegrals sowie der Norm von $V_{\alpha} \chi_{\alpha}(t)$ zu beweisen hat. Das Zeitintegral ist endlich wegen der Schwerpunktbewegung U_{OCM} , falls U_{OCM} auf Gaußpakete angewendet wird (d.h. in $\chi_{\alpha} = g_{\alpha}(x) \prod_{j=1}^k \phi_{\alpha_j}$ stellt man g_{α} durch ein Gaußpaket dar). Das Ortsintegral ist endlich, weil V_{α} quadratintegrabel ist. Dies wurde zum erstenmal von N.M. Hack (Nuovo Cimento Vol. 13, p.231, 1959) gezeigt.

Aus der Zeitinvarianz von $\Omega_{\alpha\pm}(s)$ folgt leicht die sogenannte Intertwining Eigenschaft:

$$\begin{aligned} (3.20) \quad s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}'(t-s) U_{\alpha}(t-s) &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left(U(t-r) U(r-s) \right)^{-1} U_{\alpha}(t-r) U_{\alpha}(r-s) \\ &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}'(r-s) \tilde{U}'(t-r) U_{\alpha}(t-r) U_{\alpha}(r-s) \\ &= \tilde{U}'(r-s) \Omega_{\alpha\pm}(r) U_{\alpha}(r-s) \end{aligned}$$

d.h.

$$(3.21) \quad U(r-s) \Omega_{\alpha\pm}(s) = \Omega_{\alpha\pm}(r) U_{\alpha}(r-s)$$

Da $\Omega_{\alpha\pm}$ unabhängig von Zeitreferenzpunkt ist, erhält man schließlich:

$$(3.22) \quad U(r-s) \Omega_{\alpha\pm}(0) = \Omega_{\alpha\pm}(0) U_{\alpha}(r-s)$$

durch Differenzieren nach r und setzen von $r = s$:

$$(3.23) \quad -i H \Omega_{\alpha\pm} = \Omega_{\alpha\pm} (-i H_{\alpha}) \quad \text{d.h.} \quad \Omega_{\alpha\pm} H_{\alpha} = H \Omega_{\alpha\pm}$$

Es erweist sich als zweckmäßig (und übersichtlicher) die verschiedenen Möller-Operatoren Ω_{α} (zu verschiedenen α) als Komponenten eines Operators $\Omega_{\pm}$ zu betrachten:

$$(3.24) \quad \left(\Omega_{\alpha\pm}(s) \right) = \Omega_{\pm}(s)$$

$\Omega_{\pm}$ ist eine isometrische Abbildung ($\|\Omega x\| = \|x\|$) von dem Hilbertraum $H_{\text{ex}} = \bigoplus_{\alpha} H_{\alpha}$ auf H : Ω_{+} bildet die in-Zustände auf die Zustände des vollen Systems ab, während Ω_{-} die out-Zustände auf H abbildet (Taylor [1972]).

Die S-matrix ist definiert durch

$$(3.25) \quad S(t) = \Omega_{-}^{\dagger}(t) \Omega_{+}(t) = (S_{\alpha\beta}(t)) = (\Omega_{\alpha-}^{\dagger}(t) \Omega_{\beta+}(t))$$

d.h. $S_{\alpha\beta}$ bildet einen in-Zustand β in einen out-Zustand α ab:

$$(3.26) \quad \chi_{\alpha}(t) = S_{\alpha\beta}(t) \chi_{\beta}(t)$$

$S(t)$ ist genau wie Ω_{α} zeitinvariant:

$$(3.27) \quad S(t) = \Omega_{-}^{\dagger}(t) \Omega_{+}(t) = \Omega_{-}^{\dagger}(r) \Omega_{+}(r) = S(r)$$

Daraus folgt nun der Energiesatz, d.h. der Energieerwartungswert im in-Kanal α ist gleich dem Energieerwartungswert im out-Kanal β :

$$\begin{aligned} (3.28) \quad E_{\alpha} &= \langle \alpha | H_{\alpha} | \alpha \rangle = \langle \rho | S_{\alpha\beta}^{-1} H_{\alpha} S_{\alpha\beta} | \rho \rangle = \langle \rho | \Omega_{\rho+}^{\dagger} \Omega_{\alpha-} H_{\alpha} S_{\alpha\beta} | \rho \rangle \\ &= \langle \rho | \Omega_{\rho+}^{\dagger} \Omega_{\alpha-} \Omega_{\alpha-}^{\dagger} H \Omega_{\rho+} | \rho \rangle = \langle \rho | \Omega_{\rho+}^{\dagger} \Omega_{\alpha-} \Omega_{\alpha-}^{\dagger} \Omega_{\rho+} H_{\rho} | \rho \rangle \\ &= \langle \rho | S_{\alpha\beta}^{-1} S_{\alpha\beta} H_{\rho} | \rho \rangle = \langle \rho | H_{\rho} | \rho \rangle = E_{\rho} \end{aligned}$$

dabei benutzten wir zweimal die Intertwining Beziehung, um zu beweisen, daß

$$(3.29) \quad H_{\rho} = S_{\alpha\beta}^{-1} H_{\alpha} S_{\alpha\beta}$$

ist.

b) Zeitunabhängige Vielkanalstreutheorie

Die zeitabhängige Formulierung aus Abschnitt a) beschreibt zwar die physikalische Anschauung des Streuprozesses. Doch erweist es sich als zweckmäßiger praktische Berechnungen innerhalb eines zeitunabhängigen Formalismus durchzuführen (z.B. mit Hilfe einer Goldenen Regel, doch werden wir weiter hinten zeigen, daß es effektivere Methoden als die Berechnung aller Matrixelemente und Summation über Anfangs- und Endzustände gibt). Man würde deswegen erwarten, daß man als Anfangspunkt für eine solche Theorie die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung wählen sollte. Formal ist dies auch richtig:

aus

$$(3.30) \quad H \psi_E = E \psi_E$$

folgt als formale Lösung

$$(3.31) \quad \psi_{E\pm} = \chi_E + (E - H_0 \pm i\eta)^{-1} V \psi_{E\pm} \quad \eta = 0^+ \quad (\text{L-S-Gleichung})$$

wobei $\eta = 0^+$ eingeführt wurde, um die Randbedingungen (retardierte resp. avancierte Lösung) zu berücksichtigen.

χ_E gehorcht dabei der freien Gleichung

$$(3.32) \quad H_0 \chi_E = E \chi_E$$

Da sich ein Streuprozess von der physikalischen Anschauung her leichter in seinem zeitlichen Verlauf verstehen läßt als im zeitunabhängigen Bild, fragte man sich, ob ein Zusammenhang zwischen den beiden Formulierungen besteht.

Formal läßt sich dies wie folgt leicht bewerkstelligen:

Wenn wir als Anfangszustand im zeitabhängigen Formalismus einen stationären Zustand wählen (obschon ein solcher Zustand sicher nicht zu einem Streuexperiment gehört, denn der Streuprozess ist ja gerade nicht stationär. Man kann auch zeigen, daß in diesem Falle $\Omega_{\alpha\pm}$ nicht existiert: siehe z.B. Kato [1966]), dann folgt aus der Integraldarstellung von $\Omega_{\alpha\pm}$ gemäß Glg. (3.18):

$$(3.33) \quad \Omega_{\alpha+} \chi_{\alpha}(0) = \chi_{\alpha}(E) - i \int_{-\infty}^0 ds \exp(iHs) V_{\alpha} e^{iE_{\alpha}s} \chi_{\alpha}(E) \\ = \chi_{\alpha}(E) - i \int_{-\infty}^0 ds e^{i(H-E_{\alpha})s} V_{\alpha} \chi_{\alpha}(E)$$

$$\text{mit } \chi_{\alpha}(0) = \chi_{\alpha}(E)$$

Nun muß man aber, wie bekannt, um die Integration sinnvoll durchführen zu können, ein adiabatisches Einschalten der Wechselwirkung postulieren:

$$\begin{aligned}
 (3.34) \quad \psi_{\alpha}(E) &= \Omega_{\alpha}(0) \chi_{\alpha}(0) = \chi_{\alpha}(E) - \int_0^{\infty} ds e^{-\gamma s} e^{i(H-E)s} V_{\alpha} \chi_{\alpha}(E) \\
 &= \chi_{\alpha}(E) - \frac{1}{i(H-E-\gamma)} (1-0) V_{\alpha} \chi_{\alpha}(E) \\
 &= \chi_{\alpha}(E) + G_{\alpha}(E) V_{\alpha} \chi_{\alpha}(E) \\
 &\quad (\text{Lippmann - Schwinger Gleichung})
 \end{aligned}$$

Diese Adiabatik ist jedoch unsinnig, da realistische Experimente nicht adiabatisch ein- und ausgeschaltet werden.

Der oben skizzierte und bekannte Übergang von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Formulierung läßt sich streng rechtfertigen, wenn man für H_{α} die Spektraldarstellung

$$(3.35) \quad H_{\alpha} = \int \lambda dP_{\lambda} \quad ; \quad U_{\alpha}(t) = \int e^{i\lambda t} dP_{\lambda}$$

benützt, denn dann kann man als Anfangszustand einen beliebigen nichtstationären Zustand wählen, der entscheidende Faktor $e^{-i E_{\alpha} t}$ tritt dann wegen der Spektraldarstellung von H_{α} auf. Physikalisch ist dieses Vorgehen gleichbedeutend mit dem Übergang von einem stationären Zustand zu einer Superposition mehrerer Zustände, z.B. einem Wellenpaket.

Die Adiabatik kann man ebenfalls umgehen, wie im Buch von B. Simon (Simon [1971]) gezeigt wird.

Diese Probleme der mathematischen Rechtfertigung interessieren hier jedoch nicht primär. Vielmehr sollte erwähnt werden, wie im Falle zeitlich konstanter Potentiale der Übergang von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Streutheorie durchgeführt werden kann. Bei zeitlich variablen Potentialen ist dieser Übergang in der hier angegebenen Form nicht mehr möglich. Deswegen werden wir im folgenden Kapitel eine andere Methode verwenden und anschließend zeigen, inwiefern man damit auch den Fall zeitlich konstanter Streupotentiale behandeln kann.

4. Vielkanalstreutheorie für zeitlich variable Potentiale

Wir werden in diesem Kapitel eine Streutheorie für zeitlich variable Streupotentiale entwickeln. Dabei werden wir uns so eng wie möglich an die Formulierung der gewöhnlichen Streutheorie, wie sie in Kapitel 3 dargestellt wurde, anlehnen. Uns geht es hierbei nicht so sehr um eine möglichst große Allgemeinheit, vielmehr möchten wir versuchen, Gemeinsamkeiten und Unterschiede der beiden Streutheorien zu betonen. Gemeinsamkeiten gibt es vor allem in der zeitabhängigen Darstellung (Abschnitt a)), wobei allerdings die Zeitentwicklung bei Anwesenheit eines zeitabhängigen Potentials sich nicht so einfach ergibt wie im konservativen Fall. Bei der zeitunabhängigen Formulierung (Abschnitt b)) sind wir gezwungen einen völlig anderen Weg einzuschlagen als in Kapitel 3 Abschnitt b), falls wir versuchen, geschlossene Ausdrücke anzugeben und nicht eine Störungsreihe aufzusummieren. Wir werden jedoch zeigen, daß wir im Falle zeitlich konstanter Potentiale die Ergebnisse (Lippmann-Schwinger-Gleichungen) der zeitunabhängigen Formulierung gemäß Kapitel 3 Abschnitt b) zurück erhalten.

a) Zeitabhängige Vielkanalstreutheorie

Wir wollen das zeitliche Verhalten eines Systems untersuchen, das sich für eine bestimmte (im allgemeinen endliche) Zeit unter dem Einfluß einer äußeren zeitabhängigen Störung befindet. Für die folgenden Betrachtungen genügt es, wenn wir uns vorstellen, daß das System (incl. äußerer zeitabhängiger Störung) durch einen Hamiltonoperator der Gestalt

$$(4.1) \quad H_N(t) = H(t) = H_0 + V + \phi(t) = H_V + \phi(t)$$

mit

$$(4.2) \quad H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i}$$

$$(4.3) \quad V = \sum_{i,j} V_{ij}$$

$$(4.4) \quad \phi(x,t) = \sum_i \phi_i(\vec{x}_i, t)$$

beschrieben wird (wir könnten auch $\phi = \sum_{i,j} \phi_{ij}(\vec{x}_i, \vec{x}_j, t)$ zulassen). Wir setzen auch voraus, daß die Potentiale V_{ij} Eigenschaften haben, die eine sinnvolle Definition des formalen Ausdrucks (4.3) resp.

von $H_V = H_0 + V$ ermöglichen. Vom zeitlich variablen Potentials $\phi(t)$ verlangen wir neben einem gutmütigen Verhalten bezüglich der Ortsabhängigkeit auch noch, daß

$$(4.5) \quad |\phi(\cdot, t)| < C < \infty$$

sowie

$$(4.6) \quad \frac{\partial}{\partial t} \phi_1(\cdot, t)$$

stetig als Funktion der Zeit und gutmütig in Bezug auf ihre Ortsabhängigkeit ("gutmütig" könnte man zum Beispiel durch die Forderung $\int d^3x |\phi_1(\vec{x}, t)|^2 < \infty$ präzisieren).

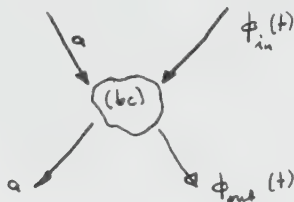
Die stetige Differenzierbarkeit ist keine allzustarke Einschränkung, denn die physikalisch wichtigen Größen lassen sich oft als Orts- und Zeitableitungen der Potentiale darstellen, und im allgemeinen wird man von diesen Größen (z.B. der elektromagnetischen Feldstärke) ein stetiges Verhalten bezüglich der Zeit (nicht bezüglich der Ortsabhängigkeit) verlangen.

Weil wir uns nur für den Fall interessieren, daß ein zeitlich konstantes System (hier beschrieben durch $H_0 + V$) an einem zeitlich variablen Potential (hier $\phi(t)$) streut und man sowohl die Präparation der Anfangszustände als auch die Messungen am gestreuten System (für $t \rightarrow \infty$) außerhalb des Bereiches durchführt in dem $\phi(t)$ effektiv wirksam ist, können wir wie in Kapitel 3 die Bewegung des Systems, welches durch $H(t)$ beschrieben wird, sowohl für sehr große positive als auch für sehr große negative Zeiten mit der Bewegung eines Systems vergleichen, bei dem $\phi(t)$ fehlt. Anschaulich liegt dies daran, daß der räumliche Bereich, wo $\phi(t)$ eine wesentliche Wirkung auf die Bewegung der eingeschossenen Partikel zeigt, nur eine beschränkte Ausdehnung haben soll, oder die Zeitabhängigkeit von $\phi(t)$ so ist, daß $\phi(t) \rightarrow 0$ für $|t| \rightarrow \infty$. Betrachten wir dazu ein Beispiel:



die beiden Teilchen a und (bc) ((bc) bedeutet, daß sich die zwei Teilchen in einem gebundenen Zustand befinden; (bc)* soll andeuten, daß das System (bc) angeregt wurde) streuen am zeitabhängigen Potential ϕ und am Ww -Potential $V_{a-(bc)}$. In der Photoemission wird diese Voraussetzung tatsächlich erfüllt sein, so daß wir uns nicht auf Fälle einlassen wollen, wo eines der Teilchen (in Fig. (4.1) z.B. das Teilchen a) bei der Streuung sozusagen von $\phi(t)$ angezogen wird.

Wir könnten obiges Streuexperiment auch anders betrachten, indem wir uns auf eines der Teilchen ((bc) oder a) setzen. Dann hätten wir folgende Streusituation vor uns (zeitlich gesehen):



d.h. wir sehen ein Teilchen a und ein Feld (resp. Potential) $\phi(t)$ auf uns zufliegen, (bc) wechselwirkt mit beiden und sowohl $\phi(t)$ als auch a fliegen wieder weg und lassen (bc) in einem eventuell angeregten Zustand (bc)* zurück ($\phi(t)$ wird bei der Photoemission das elektromagnetische Feld sein). Bei dieser Beschreibung müssen wir aber in der Asymptotik Aussagen über den Zustand des Feldes $\phi_{in}(t)$ und $\phi_{out}(t)$ machen, während wir bei der Beschreibung gemäß Fig. 4.1 den Effekt von a und (bc) auf $\phi(t)$ außer acht lassen und den Zustand des Feldes $\phi(t)$ nicht mitnehmen, d.h. die Wellenfunktionen des Experimentes gemäß Fig. 4.1 geben keinen expliziten Aufschluß über $\phi(t)$, während bei einem Experiment gemäß Fig. 4.2 das Feld $\phi(t)$ explizit mit dem Zustand des N-Teilchensystems H_V gekoppelt wird (ψ für ein Experiment gemäß Fig. 4.2 ist also von der Form $\psi = \chi_N \otimes \chi_\phi$). In der Photoemission interessieren wir uns aber speziell für die emittierten Elektro-

nen und betrachten das elektromagnetische Feld nur als Hilfsmittel, um die Elektronen aus dem Festkörper herauszuholen. Der Zustand des Strahlungsfeldes interessiert uns nur insofern als wir davon ausgehen möchten, daß wir ein Feld aus einem sehr engen Frequenzbereich zur Verfügung haben. Das Feld wird außerhalb des eigentlichen Photoemissionsexperimentes erzeugt und wir interessieren uns nicht für eventuelle Rückwirkungen des emittierten Elektrons auf die Strahlungsquelle. Würden wir diese Effekte alle mitberücksichtigen, so hätten wir wieder ein abgeschlossenes System, aber weil wir die Quellen des Strahlungsfeldes (Ladungs- und Stromverteilungen zur Erzeugung von $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t)$ vernachlässigen, haben wir ein offenes System zu betrachten (beschrieben durch eine Wellenfunktion $\Psi = \chi_N$). Wir werden allerdings bei der physikalischen Diskussion der einzelnen Terme, die in der Photoemission auftreten, zeigen, wie man wegen des Energie- und Impulsübertrages von $\emptyset$ an das Elektronensystem, zurückschließen kann auf den durch diesen Term beschriebenen optischen Vorgang (Absorption, Emission, Reflexion oder Transmission) d.h. wir können indirekt Rückschlüsse ziehen über $\emptyset(t)$.

Wir können die Betrachtungen jedoch auch prinzipiell für allgemeinere Systeme durchführen, und uns nicht auf die Photoemission beschränken. Physikalisch kann man sich vorstellen, daß ein allgemeines System nur dadurch durch einen zeitabhängigen Schrödingeroperator beschrieben wird, weil wir den Einfluß einzelner Größen (Teilsysteme) auf ein uns besonders interessierendes Teilsystem berücksichtigen möchten. Das System als Ganzes ist dann zwar konservativ, aber weil wir Teilsysteme weglassen, jedoch deren Einfluß auf das uns speziell interessierende Teilsystem (S) mitberücksichtigen, können wir einen explizit zeitabhängigen Anteil zu H_S , dem Hamiltonoperator des interessierenden Teiles, erhalten.

Diese zeitabhängigen Potentiale beschreiben somit den Energieaustausch vom Teilsystem S mit seiner Umgebung. Bei einer zeitabhängigen Formulierung interessieren wir uns wieder für das zeitliche Verhalten von Ψ_S für sehr große positive und negative Zeiten. Bevor wir uns aber damit beschäftigen können, müssen wir uns zuerst Gedanken machen, ob wir überhaupt noch eine so einfache Zeitentwicklung der Zustände haben, wie im konservativen Fall.

Im konservativen Fall wußten wir, wie wir vorzugehen hatten: man muß untersuchen ob H sinnvoll definiert ist (Selbstadjungiertheit), was wir stillschweigend vorausgesetzt haben, da diese Frage hier nicht von primärem Interesse ist. Dann folgte bereits (wegen des Satzes von Stone), daß eine sog. einparametrische Gruppe unitärer Transformationen $U(t-s)$ existiert, mit

$$(4.7) \quad \psi_t = U(t-s) \psi_s$$

$$(4.8) \quad U(t-s) = e^{-i H(t-s)}$$

$$\text{und } (4.9) \quad [H, H] = 0$$

In den uns hier spezieller interessierenden Fällen mit $\phi(t) \neq 0$ setzen wir zwar auch voraus, daß $H(t)$ sinnvoll definiert ist. Aber dies reicht nicht mehr aus, denn der Hamiltonoperator hängt ja jetzt von einem Parameter, der Zeit ab, und für jeden Zeitpunkt haben wir eigentlich einen anderen Operator. Deswegen wird im allgemeinen auch

$$(4.10) \quad [H(t), H(s)] \neq 0 \quad s \neq t$$

gelten. $H(t)$ beschreibt sozusagen für jeden Zeitpunkt ein anderes System.

Die Frage nach der Existenz und der expliziten Form der Dynamik erweist sich deswegen als weit schwieriger als im konservativen Fall. Dies kann man sich formal wie folgt klarmachen: wenn man die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$(4.11) \quad H(t) \psi(t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \quad (\hbar = 1)$$

formal integriert, so erhält man

$$(4.12) \quad \psi(t) = e^{-i \int_s^t H(\tau) d\tau} \cdot \psi(s) = U(t,s) \psi(s)$$

Nun kann man wegen dieser formalen Darstellung von $U(t,s) \neq U(t-s)$ bereits vermuten, daß man irgendwelche Forderungen an das Zeitverhalten der Funktion $\phi(t)$ stellen muß, weil das Integral

$$(4.13) \quad \int_s^t d\tau \quad H(\tau) = (t-s)(H_0 + v) + \int_s^t d\tau \quad \phi(\tau)$$

sonst eventuell keinen Sinn hat (im Buch von Jauch [1968] wird erwähnt, daß keine allgemeine Integrationstheorie für Gleichungen der Form (4.10) existiert). Weil $U(t,s) \neq U(t-s)$ ist, d.h. die Zeitentwicklung nicht mehr nur noch von der Zeitdifferenz, sondern von beiden Zeitpunkten explizit abhängt, bildet $U(t,s)$ keine einparametrische Gruppe unitärer Transformationen mehr. Die Darstellung von $U(t,s)$ wie sie in Glg. (4.12) steht, ist im allgemeinen inkorrekt. Zur korrekten Lösung können wir uns auf eine Arbeit von Kato [1953] stützen, in der die Integration von zeitabhängigen Gleichungen der Form (4.11) in einem allgemeineren Rahmen (und in anderen, allgemeineren Räumen als hier) untersucht wurde. Diese Arbeit wird z.B. im Buch von Simon [1971] auf den uns interessierenden Fall (Quantenmechanik) angewendet. Die wesentlichen Ergebnisse sind, unter teils schwächeren als in den Gleichungen (4.5) und (4.6) geforderten Voraussetzungen an den zeitabhängigen Anteil $\phi(t)$:

die Zeitentwicklung wird durch eine 2parametrische Schar unitärer Operatoren $U(t,s)$ bestimmt mit

- (4.14) 1) $U(t,s)U(s,r) = U(t,r)$
 2) $U(t,r)$ ist unitär
 3) $U(r,r) = \mathbb{1}$
 4) $U(t,s)$ ist beschränkt
 5) $U(t,s) = U(s,t)^*$ falls sowohl $U(t,s)$ als
 auch $U(s,t)^*$ existieren.

Die von uns aus physikalischen Überlegungen gemachten Voraussetzungen (Glg. (4.5) und (4.6) erlauben also bereits, die Dynamik des Systems sinnvoll zu definieren.

Die explizite Lösung $U(t,s)$, die ebenfalls von Kato angegeben wurde, läßt sich schreiben als

$$(4.15) \quad U(t,s) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} e^{-i(t-t_{n-1})H(\tau_{n-1})} e^{-i(t_{n-1}-t_{n-2})H(\tau_{n-2})} \dots e^{-i(t_1-s)H(\tau_1)}$$

mit

$$\begin{aligned} s_0 &= t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n = t; \\ t_{k-1} &\leq \tau_n \leq t_n \\ \varepsilon &= \max_{1 \leq k \leq n} (t_k - t_{k-1}) \end{aligned}$$

Wir können die von Kato konstruierte Lösung folgendermaßen anschaulich deuten:

man approximiert die Zeitentwicklung $U(t,s)$ im Intervall $[t_k, t_{k+1}]$ durch die Zeitentwicklung zum Hamiltonoperator des Systems zu einer Zeit τ_k , die im obigen Intervall liegt. Daß diese Zeitentwicklungen $\exp(-i(t_k - t_{k-1}) \cdot H(\tau_k))$ existieren, folgt aus dem Satz von Stone, denn $H(\tau_k)$ ist selbstadjungiert.

Aus diesen Ergebnissen erkennt man recht deutlich, daß sich nicht-konservative Systeme im allgemeinen nicht so einfach beschreiben lassen wie zeitinvariante Systeme.

Da im allgemeinen $H(t)$ nicht mit $H(t')$ (für $t \neq t'$) kommutiert, kommutiert auch $U(t,s)$ nicht mit $H(r)$. Deswegen muß man bei der Differentiation von $U(t,s)$ die Reihenfolge beachten:

$$(4.16) \quad \frac{\partial}{\partial t} U(t,s) = -i H(t) U(t,s)$$

$$(4.17) \quad \frac{\partial}{\partial s} U(t,s) = U(t,s) i H(s)$$

und in der Lösung von Kato gemäß Glg. (4.15) kann man auch im allgemeinen die Terme nicht zusammenfassen gemäß:

$$(4.18) \quad \exp(-i(t_k - t_{k-1})H(\tau_k)) \exp(-i(t_k - t_{k-2})H(\tau_{k-1})) \neq \exp(-i(t_k - t_{k-1})H(\tau_k) - i(t_{k-1} - t_{k-2})H(\tau_{k-1}))$$

Falls (4.18) gelten würde (für alle k), so könnte man die einzelnen Terme im Exponent zusammenfassen zu

$$(4.19) \quad -i \sum_k dt_k H(\tau_k) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0_+} -i_s \int_s^t d\tau H(\tau)$$

d.h. die formale Integration (Glg.(4.12)) wäre korrekt.

Neben der von Kato angegebenen Lösung kann man, zumindest formal, eine Integraldarstellung (Integralgleichung) von $U(t,s)$ finden. Dazu definieren wir

$$(4.20) \quad U_V(t-s) := e^{-i H_V \cdot (t-s)}$$

mit

$$(4.21) \quad H_V = H_0 + V$$

dem $\phi(t)$ freien Hamiltonoperator. Zur Herleitung der Integralgleichung für $U(t,s)$ gehen wir aus von

$$(4.22) \quad K(t) := U_V^{-1}(t-s)U(t,s) \quad (s \text{ halten wir fest})$$

Differenziert man $K(t)$ nach t , so erhält man:

$$\begin{aligned} (4.23) \quad \frac{d}{dt}K(t) &= i U_V^{-1}(t-s) \cdot H_V \cdot U(t,s) - i U_V^{-1}(t,s) \cdot H(t) U(t,s) \\ &= -i U_V^{-1}(t,s) (H(t) - H_V) U(t,s) \\ &= -i U_V^{-1}(t,s) \phi(t) U(t,s) \end{aligned}$$

Integriert man jetzt bezüglich der Zeit t , so erhält man

$$\begin{aligned} (4.24) \quad \int_s^t d\tau \frac{d}{d\tau} K(\tau) &= K(t) - K(s) = K(t) - 1 = K(t) - U_V^{-1}(t-s)U_V(t-s) \\ &= -i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-s) \phi(\tau) U(\tau,s) \\ &= -i \int_s^t d\tau (U_V(\tau-s) = U_V(\tau-t)U_V(t-s))^{-1} \\ &\quad \phi(\tau) U(\tau,s) \\ &= -i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(t-s)U_V^{-1}(\tau-t) \phi(\tau) U(\tau,s) \\ &= -i U_V^{-1}(t-s) \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-t) \phi(\tau) U(\tau,s) \\ &= U_V^{-1}(t-s) U(t,s) - U_V^{-1}(t-s) U_V(t-s) \end{aligned}$$

d.h.

$$\begin{aligned} (4.25) \quad U_V^{-1}(t-s)U(t,s) &= U_V^{-1}(t-s)U_V(t-s) - i \int_s^t d\tau \\ &\quad U_V^{-1}(\tau-t) \phi(\tau) U(\tau,s) \\ &= U_V^{-1}(t-s) \{ U_V(t-s) \cdot i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-t) \\ &\quad \phi(\tau) U(\tau,s) \} \end{aligned}$$

also schließlich durch Vergleich beider Seiten

$$(4.26) \quad U(t,s) = U_V(t-s) - i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-t) \phi(\tau) U(\tau,s)$$

Wir wollen auch diese Darstellung von $U(t,s)$ noch etwas genauer untersuchen. Zu diesem Zweck klammern wir in (4.26) nochmals $U_V(t-s)$ aus:

$$\begin{aligned} (4.27) \quad U(t,s) &= U_V(t-s) \{ \mathbb{1} - i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-t) U_V^{-1}(\tau-t) \\ &\quad \phi(\tau) U(\tau,s) \} \\ &= U_V(t-s) \{ \mathbb{1} - i \int_s^t d\tau [U_V(\tau-t) U(t-s)]^{-1} \phi(\tau) U(\tau,s) \} \\ &= U_V(t-s) \{ \mathbb{1} - i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-s) \phi(\tau) U(\tau,s) \} \end{aligned}$$

Jetzt iterieren wir formal die Gleichung (indem wir unter dem Integral $U(\tau,s)$ durch seine Integraldarstellung ersetzen):

$$\begin{aligned} (4.28) \quad U(t,s) &= U_V(t-s) \{ \mathbb{1} - i \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-s) \phi(\tau) U_V(\tau-s) \\ &\quad + (-i)^2 \int_s^t d\tau U_V^{-1}(\tau-s) \phi(\tau) \int_s^\tau d\tau' U_V^{-1}(\tau'-s) \\ &\quad + \dots \} \end{aligned}$$

Vergleicht man den Ausdruck innerhalb der Klammer mit der Dysonreihe, also der Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild, so kann man erkennen, daß beide Reihen identisch sind (wir haben in $U(t,s)$ die "freie" Dynamik, d.h. die $\phi(t)$ freie Dynamik abgespalten. Dies entspricht genau dem Wechsel vom Schrödingerbild ins Wechselwirkungsbild: $U(t,s) = U_V(t-s) U_I(t,s)$).

In der mathematischen Literatur ist die Integralgleichung (4.26) unter dem Namen "Duhamel'sches Prinzip" bekannt (Yoshida [1965]). Der Formalismus ist soweit wir ihn bisher dargestellt haben, noch sehr abstrakt. Wir möchten deshalb versuchen, etwas Einblick in die Struktur des Formalismus zu erhalten, indem wir speziellere Annahmen über die Zeitabhängigkeit der Wechselwirkung machen. Da viele physikalische Vorgänge periodisch sind, untersuchen wir den Fall

$$(4.29) \quad \phi(t) = \phi(t+T) \quad T \text{ reell, positiv}$$

(ϕ soll bezüglich der Ortsvariable allerdings genügend stark ab-

fallen, da wir sonst nie hoffen können, daß ψ_t für $t \rightarrow \pm \infty$ mit der Wellenfunktion eines zeitinvarianten Systems vergleichbar wird).

Wir wollen nun zeigen, daß unter der Bed. (4.28) die Zeitentwicklung die Eigenschaft

$$(4.30) \quad U(t,s) = U(t+T,s+T)$$

hat. Dazu benützen wir die Darstellung (4.15) für $U(t,s)$:

$$\begin{aligned} U(t,s) &= s\text{-}\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} e^{-i(t-t_{n-1}) H(\tau_{n-1})} \dots e^{-i(t_1+T-(s+T)) H(\tau_0)} \\ &= s\text{-}\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} e^{-i(t+T-(t_{n-1}+T)) H(\tau_{n-1})} \dots e^{-i(t_1+T-(s+T)) H(\tau_0)} \end{aligned}$$

nützt man jetzt noch die Eigenschaft (4.29) aus in der Form

$$(4.31) \quad H(t) = H_0 + V + \phi(t) = H_0 + V + \phi(t+T) = H(t+T)$$

so können wir stets $H(\tau_k)$ durch $H(\tau_k+T)$ ersetzen:

$$U(t,s) = s\text{-}\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} e^{-i(t+T-(t_{n-1}+T)) H(\tau_{n-1}+T)} \dots e^{-i(t_1+T)} H(\tau_0+T)$$

dies ist aber gerade identisch mit der ursprünglichen Definition der Zeitentwicklung U , allerdings nicht für (t,s) sondern für $(t+T,s+T)$ d.h. $U(t,s) = U(t+T,s+T)$.

Wir werden diese Beziehung benützen, um ähnliche Eigenschaften der noch zu definierenden Mølleroperatoren und der S-matrix zu zeigen. Weil wir verlangten, daß $t \rightarrow \pm \infty$ sich ψ_t mit einem Zustand zu einem konservativen System $H = H_0 + V$ oder $H_\alpha = H_t - V_\alpha(t)$ (wobei wir hier einen Kanalhamiltonoperator H_α wie in Gleichung (3.6) einführen), brauchen wir den Fall, daß H_α zeitabhängig ist, hier nicht zu betrachten ($V_\alpha(t) = \phi(t) + V_\alpha$).

Die Forderung $\psi_a(t) \xrightarrow[t \rightarrow \pm \infty]{} \chi_a(t)$ läßt sich präzisieren durch

$$(4.32) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| \psi(t) - \chi_{\alpha}(t) \| = 0$$

(wie in Gleichung (3.14)). Wie im 3. Kapitel formen wir den Ausdruck um und definieren wie in Glg. (3.16) den Mølleroperator

$$(4.33) \quad \Omega_{\alpha\pm}(t) = s\text{-}\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(\tau, t) U_{\alpha}(\tau-s)$$

Der wichtige Unterschied der beiden Gleichungen (4.33) und (3.16) besteht im Faktor U , der in Glg. (4.33) komplizierter ist als in Glg. (3.16). Im Gegensatz zu den Mølleroperatoren aus Kapitel 3 haben die in diesem Kapitel definierten $\Omega_{\alpha\pm}(s)$ allerdings nicht mehr die Eigenschaft, daß sie zeitinvariant sind (Glg. 3.17), d.h. $\Omega_{\alpha\pm}(s) \neq \Omega_{\alpha\pm}(t)$ ($s \neq t$). Wir können jedoch eine Beziehung zwischen den Mølleroperatoren zu verschiedenen Zeiten herleiten:

$$\begin{aligned} (4.34) \quad \Omega_{\alpha\pm}(s) &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(t, s) U_{\alpha}(t-s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} (U(t, r) U(r, s))^{-1} \\ &\quad \cdot U_{\alpha}(t-r) U_{\alpha}(r-s) \\ &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(r, s) U^{-1}(t, r) U_{\alpha}(t, r) \cdot U_{\alpha}(r-s) \\ &= U^{-1}(r, s) s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(t, s) U_{\alpha}(t-r) \cdot U_{\alpha}(r-s) \\ &= U^{-1}(r, s) \Omega_{\alpha\pm}(r) \cdot U_{\alpha}(r-s) \end{aligned}$$

Diese Beziehung entspricht der Intertwining Beziehung (3.21)

$$(4.35) \quad U(r, s) \Omega_{\alpha\pm}(s) = \Omega_{\alpha\pm}(r) U_{\alpha}(r-s)$$

Im Gegensatz zu Kapitel 3 kann man daraus jedoch keine Gleichung der Form (3.23) herleiten, denn wenn man (4.35) nach r oder s differenziert erhält man:

$$(4.36) \quad \frac{d}{dr} (U(r, s) \Omega_{\alpha\pm}(s)) = -i H(r) U(r, s) \Omega_{\alpha\pm}(s) = \frac{d}{dr} \Omega_{\alpha\pm}(r) \cdot U_{\alpha}(r-s) + \Omega_{\alpha\pm}(r) (-i H_{\alpha}) U_{\alpha}(r-s)$$

oder wenn wir nach $\frac{d\Omega_{\alpha}(r)}{dr}$ auflösen:

$$(4.37) \quad \frac{d}{dr} \Omega_{\alpha\pm}(r) = -i H(r) \cdot U(r,s) \Omega_{\alpha\pm}(s) U_{\alpha}^{-1}(r-s) + \Omega_{\alpha\pm}(r) (+i) H_{\alpha} \\ = -i H(r) \cdot \Omega_{\alpha\pm}(r) + i H_{\alpha} \Omega_{\alpha\pm}(r)$$

d.h. $\Omega_{\alpha\pm}(r)$ gehorcht einer Heisenberg-ähnlichen Gleichung.

Auch hier ist es wie in Kapitel 3 sinnvoll die Mølleroperatoren zu verschiedenem α als Komponenten eines Vektoroperators $\Omega_{\alpha\pm}(r)$ aufzufassen gemäß Glg. (3.24):

$$(4.38) \quad \Omega_{\pm}(r) = (\Omega_{\alpha\pm}(r))$$

$\Omega_{\alpha\pm}(r)$ bildet auch hier die asymptotischen Zustände, d.h. die Zustände zu den Fragmentkanalhamiltonoperatoren $H_{\alpha} : \chi_{\alpha}$, isometrisch ($\|\Omega_{\alpha}\chi\| = \|\chi\|$) auf Zustände des eigentlich der Betrachtung zu Grunde liegenden Systems $H(t)$ ab:

Ω_{+} bildet in-Zustände (d.h. präparierte Zustände) auf die Zustände Ψ des vollen Systems ab, während Ω_{-} die out-Zustände auf Ψ abbildet.

Die S-matrix läßt sich wie in Kapitel 3 (Glg. (3.25)) definieren durch

$$(4.39) \quad S(t) = \Omega_{-}(t) \Omega_{+}(t) = (S_{\alpha\beta}(t)) = (\Omega_{\alpha-}^{+}(t) \Omega_{\beta+}(t))$$

d.h. wie in Glg. (3.26) bildet $S_{\alpha\beta}(t)$ einen in-Zustand β auf einen out-Zustand α ab:

$$(4.40) \quad \chi_{\alpha}(t) = S_{\alpha\beta}(t) \chi_{\beta}(t)$$

Im Gegensatz zu Kapitel 3 ist jedoch hier S nicht zeitinvariant, denn die Mølleroperatoren $\Omega_{\alpha\pm}(r)$ sind es ja auch nicht. Wir können jedoch analog zur Verknüpfung der Mølleroperatoren zu verschiedenen Zeitpunkten (Glg. (4.34)) auch die S-matrizen zu verschiedenen Zeiten miteinander verknüpfen. Zu diesem Zwecke multiplizieren wir die Gleichung (4.34) von links mit $\Omega_{\beta+}^{\dagger}(s)$ und erhalten:

$$\begin{aligned}
 (4.41) \quad \Omega_{\beta-}^{+}(s) \Omega_{\alpha+}(s) &= S_{\beta\alpha}(s) = \Omega_{\beta-}^{+}(s) U_{\beta}^{-1}(r, s) \Omega_{\alpha+}^{+}(r) U_{\alpha}(r-s) \\
 &= [U(r, s) \Omega_{\beta-}(s)]^{-1} \Omega_{\alpha+}(r) U_{\alpha}(r-s) \\
 &= [\Omega_{\beta-}(r) U_{\beta}(r-s)]^{-1} \Omega_{\alpha+}^{+}(r) U_{\alpha}(r-s) \\
 &= U_{\beta}^{-1}(r-s) \Omega_{\beta-}^{+}(r) \Omega_{\alpha+}(r) U_{\alpha}(r-s) \\
 &= U_{\beta}^{-1}(r-s) S_{\beta\alpha}(r) U_{\alpha}(r-s)
 \end{aligned}$$

oder wenn wir die Gleichung noch von links mit U_{β} multiplizieren:

$$(4.42) \quad U_{\beta}(r-s) S_{\beta\alpha}(s) = S_{\beta\alpha}(r) U_{\alpha}(r-s)$$

Aus Glg. (4.41) folgt, daß $S_{\alpha\beta}(r)$ die Differentialgleichung

$$(4.43) \quad \frac{dS_{\beta\alpha}}{dt}(t) = -iH_{\beta} S_{\beta\alpha}(t) + i S_{\beta\alpha}(t) \cdot H_{\alpha}$$

erfüllt. Im allgemeinen besteht also im Gegensatz zu Kapitel 3 keine Beziehung zwischen in- und out-Hamiltonoperator der Form (3.30) (d.h. $H_{\alpha} = S_{\alpha\beta}^{-1} H_{\beta} S_{\alpha\beta}$). Deswegen ist auch der Energieerwartungswert im in-Kanal im allgemeinen von jenem im out-Kanal verschieden:

$$\begin{aligned}
 (4.44) \quad E_{\alpha} &= \langle \alpha | H_{\alpha} | \alpha \rangle = \langle \alpha | (-i S_{\beta\alpha}^{-1}(t) \frac{dS_{\beta\alpha}(t)}{dt}) | \alpha \rangle = \langle \alpha | S_{\beta\alpha}^{-1}(t) \\
 &\quad H_{\beta} S_{\beta\alpha}(t) | \alpha \rangle \\
 &= \langle \alpha | (-i S_{\beta\alpha}^{-1}(t) \frac{dS_{\beta\alpha}(t)}{dt}) | \alpha \rangle + \langle \beta | H_{\beta} | \beta \rangle \\
 &= \langle \alpha | (-i S_{\beta\alpha}^{-1}(t) \frac{dS_{\beta\alpha}(t)}{dt}) | \alpha \rangle + E_{\beta}
 \end{aligned}$$

wobei wir zum einen die Beziehung (4.40) zum anderen die Tatsache, daß H_{α} resp. H_{β} sicher Eigenfunktionen $|\alpha\rangle$ resp. $|\beta\rangle$ besitzen (da sie zeitunabhängige Hamiltonoperatoren sind), ausgenützt haben. Aus Glg. (4.44) erkennt man, daß die Energien E_{α} und E_{β} nur gleich sind, wenn $\frac{dS_{\beta\alpha}}{dt}(t)$ verschwindet.

Wir wollen uns noch kurz Fragen zuwenden, die eher von rein theoretischem Interesse sind. Als erstes wollen wir das Existenzkriterium für die Mölleroperatoren aus Kapitel 3 (Glg. (3.19) auf

zeitlich variable Potentiale übertragen:

falls

$$(4.45) \quad \int_{\pm\infty}^s dt \quad ||V_{\alpha}(t)U_{\alpha}(t-\tau)\chi_{\alpha}(\tau)|| < \infty$$

dann existiert $\Omega_{\alpha\pm}(s)$ (und wegen (4.34) somit auch zu jedem anderen endlichen Zeitpunkt $s' \neq s$). Dabei ist in (4.45) $V_{\alpha}(t)$ die Kanalwechselwirkung des Fragmentkanals α , d.h. $V_{\alpha}(t) = H(t) - H_{\alpha} = \Phi(t) + \tilde{V}_{\alpha}$ weil nach Vor. H_{α} kein zeitabhängiges Potential enthalten soll; χ_{α} ist ein Zustand, der zu H_{α} gehört, d.h. eine Lösung von

$$(4.46) \quad H_{\alpha}\chi_{\alpha}(t) = i \frac{\partial}{\partial t} \chi_{\alpha}(t)$$

und U_{α} ist die Zeitentwicklung zu H_{α} :

$$(4.47) \quad U_{\alpha}(t) = e^{-i H_{\alpha} t}$$

Daß das Kriterium (4.45) tatsächlich ausreicht, um die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}$ zu sichern, folgt aus folgender Abschätzung:

$$\begin{aligned} (4.48) \quad U^{-1}(t,s)U_{\alpha}(t-s)-1 &= \int_s^t d\tau \frac{d}{d\tau} [U^{-1}(\tau,s)U_{\alpha}(\tau,s)] \\ &= \int_s^t d\tau \{U^{-1}(\tau,s)i H(\tau)U_{\alpha}(\tau-s)-U^{-1}(\tau,s) \\ &\quad i H_{\alpha}U_{\alpha}(\tau-s)\} \\ &= +i \int_s^t d\tau U^{-1}(\tau,s)V_{\alpha}(\tau)U_{\alpha}(\tau-s) \end{aligned}$$

bildet man den limes $t \rightarrow \pm\infty$, so erhalten wir gemäß Definition (4.34) die Mølleroperatoren $\Omega_{\alpha\pm}(s)$:

$$(4.49) \quad \Omega_{\alpha\pm}(s) = 1 + i \int_s^{\pm\infty} d\tau U^{-1}(\tau,s)V_{\alpha}(\tau)U_{\alpha}(\tau-s)$$

wenden wir diese Gleichung auf einen Kanalzustand χ_{α} an, so erhalten wir (wie in Glg. (3.19)), wenn wir noch die Dreiecksungleichung und die Unitarität von $U(t,s)$ ausnützen:

$$(4.50) \quad ||\Omega_{\alpha\pm}(s)\chi_{\alpha}(s)|| < ||\chi_{\alpha}(s)|| + \int_s^{\pm\infty} d\tau ||V_{\alpha}(\tau)U_{\alpha}(\tau-s)\chi_{\alpha}(s)||$$

Da $\| \chi_\alpha \|$ endlich ist, folgt die Endlichkeit von $\| \Omega_\alpha \chi_\alpha \|$ falls das Integral endlich ist.

Wie in Kapitel 3 hängt also die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}$ direkt vom Streupotential $(V_\alpha(s))$ ab. Wir zeigen in Appendix 1, daß man mit Hilfe von (4.45) die Existenz der Mølleroperatoren für die hier interessierenden Potentiale zeigen kann (wegen der Forderung (4.5) zusammen mit dem Zerfließen der Gaußpakete) z.B. existiert Ω für ein Potential der Form

$$(4.51) \quad \phi(r,t) = \phi(r) \sin(\omega t + \psi)$$

mit

$$(4.52) \quad \phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} e^{-\beta r} & r \leq R_0 \\ 0 & r > R_0 \end{cases}$$

Aus dem Konvergenzkriterium erkennen wir jedoch auch, daß z.B. eine gedämpfte Zeitabhängigkeit von ϕ die Konvergenz beschleunigen kann, und daß somit unter Umständen die Zeitabhängigkeit des Potentials eine schnellere Konvergenz bewirkt als man nur mit Hilfe des Zerfließens der Gaußpakete erreichen könnte.

Die Frage nach der asymptotischen Vollständigkeit wollen wir nur kurz streifen, da erst recht schwache Ergebnisse erzielt wurden. Ein Verfahren, welches für (schwache) zeitunabhängige Potentiale entwickelt wurde, kann man auf zeitlich variable Potentiale übertragen. Das Verfahren besteht darin zu zeigen, daß die Dyson-Reihe konvergiert (Prosser [1964]):

man muß beweisen, daß sowohl $\Omega_{\alpha\pm}$ als auch $\Omega_{\alpha\pm}^*$ existieren, da dann

$$(4.53) \quad \Omega_{\alpha\pm}^* \Omega_{\alpha\pm} = P_{in} \quad \Omega_{\alpha\pm} \Omega_{\alpha\pm}^* = P_{out}$$

und somit die Theorie asymptotisch vollständig ist (Kato [1966]). Die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}$ ergibt sich mit Hilfe des Existenzkriteriums, jene von $\Omega_{\alpha\pm}^*$ ist der eigentlich schwierige Teil.

Man stellt eine Integralgleichung für

$$(4.54) \quad \Omega_{\alpha\pm}^*(t,s) = U_{\alpha}^{-1}(t-s)U(t,s)$$

auf:

$$(4.55) \quad \Omega_{\alpha\pm}^*(t,s) = 1 - i \int_s^t d\tau U_{\alpha}^{-1}(\tau-s) V_{\alpha}(\tau) U(\tau,s)$$

(analog zur Glg. (4.48)).

Der Integrand läßt sich umschreiben zu

$$(4.56) \quad \begin{aligned} \Omega_{\alpha\pm}^*(t,s) &= 1 - i \int_s^t d\tau U_{\alpha}^{-1}(\tau-s) V_{\alpha}(\tau) U_{\alpha}(\tau-s) U_{\alpha}^{-1}(\tau-s) \\ &\quad U(\tau,s) \\ &= 1 - i \int_s^t d\tau U_{\alpha}^{-1}(\tau-s) V_{\alpha}(\tau) U_{\alpha}(\tau-s) \cdot \Omega_{\alpha\pm}^*(\tau,s) \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist analog zum geklammerten Ausdruck in Glg. (4.27), der sich durch eine Dyson-Reihe darstellen läßt, so daß aus der Konvergenz der Dyson-Reihe für $\Omega_{\alpha\pm}^*(t,s)$ die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}^*(s)$ folgt. Die Methode besteht im wesentlichen darin, die unbequeme Zeitentwicklung $U(t,s)$ zu eliminieren.

Die Frage nach der Orthogonalität der Streukanäle läßt sich wie im Falle zeitlich konstanter Potentiale untersuchen (Taylor [1972], Seite 327):

falls $\psi(t)$ resp. $\tilde{\psi}(t)$ Zustände zu $H(t)$ sind, die sich asymptotisch mit Zuständen zu H_{α} resp. $H_{\alpha}^{\vee}$ vergleichen lassen, dann gilt:

$$(4.57) \quad \langle \psi(t) | \tilde{\psi}(t) \rangle_{t \rightarrow \pm\infty} = \langle \psi | U^{-1}(t,s) U(t,s) | \tilde{\psi}_s \rangle_{t \rightarrow \pm\infty} \lim_{s \rightarrow \pm\infty} \langle \tilde{\gamma}_{\alpha\pm}(s) | e^{i H_{\alpha}(t-s)} e^{-i H_{\alpha}^{\vee}(t-s)} | \chi_{\text{in}\alpha}(s) \rangle$$

d.h. weil das Skalarprodukt zweier Vektoren zeitunabhängig ist, kann man die Betrachtung zu großen (pos. oder neg.) Zeiten durchführen, wo die Untersuchung sich auf jene bei zeitlich konstanten Potentialen reduziert.

Nach diesen sehr theoretischen Problemen versuchen wir nun etwas Einblick in die Struktur der S-matrix zu erhalten. Dazu stellen wir eine Beziehung zwischen $\Omega_{\alpha-}$ und $\Omega_{\alpha+}$ her:

$$\begin{aligned}
 (4.58) \quad \Omega_{\alpha-}(t) &= 1 + i \int_{-\infty}^t ds \, \bar{U}'(s,t) V_{\alpha}(s) U_{\alpha}(s-t) \\
 &= 1 + i \int_{-\infty}^t ds \, \bar{U}'(s,t) V_{\alpha}(s) U_{\alpha}(s-t) + i \int_{-\infty}^t ds \, (\bar{U}' V_{\alpha} U_{\alpha})(s,t) - i \int_{-\infty}^t ds \dots \\
 &= 1 - i \int_{-\infty}^t ds \, (\bar{U}' V_{\alpha} U_{\alpha})(s,t) + i \left[\int_{-\infty}^t ds + \int_{-\infty}^t ds \right] (\bar{U}' V_{\alpha} U_{\alpha})(s,t) \\
 &= \Omega_{\alpha+}(t) + i \int_{-\infty}^t ds \, \bar{U}'(s,t) V_{\alpha}(s) U_{\alpha}(s-t)
 \end{aligned}$$

Wegen der Orthogonalität der Streukanäle läßt sich $S_{\alpha\beta}(t)$ schreiben als

$$(4.59) \quad S_{\alpha\beta}(t) = \delta_{\alpha\beta} - i \int_{-\infty}^{+\infty} ds U_{\alpha}(t-s) V_{\alpha}(s) \Omega_{\beta+}(s) U_{\beta}(s-t)$$

Wie man wie folgt zeigen kann:

$$\begin{aligned}
 S_{\alpha\beta}(t) &= \Omega_{\alpha-}^+(t) \Omega_{\beta+}(t) = (\Omega_{\alpha+}^+(t) - i \int_{-\infty}^{+\infty} ds U_{\alpha}^{-1}(s-t) V_{\alpha}(s) \\
 &\quad U(s,t)) \Omega_{\beta+}(t) \\
 &= (\Omega_{\alpha+}^+(t) \Omega_{\beta+}(t) - i \int_{-\infty}^{+\infty} ds U_{\alpha}^{-1}(s-t) V_{\alpha}(s) \Omega_{\beta+}(s) U_{\beta}(s-t))
 \end{aligned}$$

wobei wir noch Gebrauch von der Intertwining Beziehung machten. Man erkennt aus der Darstellung (4.59), daß S auch im Falle zeitlich variabler Potentiale von der allgemeinen Form

$$(4.60) \quad S = 1 + R = (\delta_{\alpha\beta}) + (R_{\alpha\beta})$$

ist. Das Ergebnis, daß die S-matrix von obiger Struktur ist, wird im allgemeinen innerhalb der zeitunabhängigen Formulierung hergeleitet. Dies ist bei zeitl. variablen Potentials allerdings nicht möglich. Die Herleitungsmethode ist jedoch analog zu jener bei zeitlich konstanten Streupotentials.

Um jetzt noch weitere Aussagen über S machen zu können, müssen wir speziellere Zeitabhängigkeiten von $\phi(t)$ betrachten. Falls $\phi(t)$ periodisch ist (Glg. (4.29)) (und genügend schnell als Funktion des Ortes abfällt), so gilt Glg. (4.30), aus der wir eine entsprechende Gleichung für $\Omega_{\alpha\pm}(t)$ und $S_{\alpha\beta}(t)$ herleiten können:

$$\begin{aligned} (4.61) \quad \Omega_{\alpha\pm}(t) &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(t,s) U_{\alpha}(t-s) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(t+T, s+T) \\ &\quad U_{\alpha}(t+T-s-T) \\ &= s\text{-}\lim_{\tilde{t} \rightarrow \pm\infty} U^{-1}(\tilde{t}, s+T) U(\tilde{t}-(s+T)) = \Omega_{\alpha\pm}(s+T) \end{aligned}$$

und auf Grund der Definition (4.39) von $S(t)$ folgt daraus

$$(4.62) \quad S_{\alpha\beta}(t) = \Omega_{\alpha-}^{+}(t) \Omega_{\beta+}(t) = \Omega_{\alpha-}^{+}(t+T) \Omega_{\beta+}(t+T) = S_{\alpha\beta}(t+T)$$

Wir wollen die zeitabhängige Theorie mit einem Ergebnis abschließen, welches im Zusammenhang mit Messungen von direkter Bedeutung ist. Dazu betrachten wir das Matricelement der S -matrix $S_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} (4.63) \quad S_{\alpha_f, \beta_i}(t) &= \langle \chi_{\alpha_f}(t), S_{\alpha\beta}(t) \chi_{\beta_i}(t) \rangle = \langle \chi_{\alpha_f}(s), U_{\alpha}^{-1}(t-s) \\ &\quad S_{\alpha\beta}(t) U_{\beta}(t-s) \chi_{\beta_i}(s) \rangle \\ &= \langle \chi_{\alpha_f}(s), S_{\alpha\beta}(s) \chi_{\beta_i}(s) \rangle \\ &= S_{\alpha_f, \beta_i}(s) \end{aligned}$$

wobei wir die Beziehung (4.42) benutzt haben. Gleichung (4.63) besagt physikalisch, daß die physikalisch relevante Größe S_{α_f, β_i} auch bei zeitlich variablen Potentials nicht vom Referenzpunkt t resp. s) abhängt.

b) Zeitunabhängige Vielkanalstreutheorie

Da es für zeitlich variable Potentiale keine zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gibt, müssen wir uns zuerst kurz Gedanken machen, durch was man die stationären Zustände ersetzen könnte.

Da die stationären Zustände, Eigenzustände zu den jeweiligen Hamiltonoperatoren sind, die zugleich (spezielle) Energie- als auch (spezielle) zeitabhängige Zustände sind (in $\chi_t = \zeta_n e^{-i E_n t}$ ist ζ_n ein spezielle (Energie=Eigen)-Zustand von $H_n = H_0 + V$, χ_t ein spezieller zeitabhängiger Zustand), benützen wir die Fouriertransformation, um von der Zeitdarstellung in die Energiedarstellung zu gelangen. (Die Fouriertransformation liefert im Falle zeitlich konstanter Potentiale die übliche zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (aus der zeitabhängigen.)) Wir erhalten damit eine Gleichung

$$(4.64) \quad (H_0 + V) \Psi(E) + (\Phi \star \Psi)(E) = E \Psi(E)$$

wobei

$$(4.65) \quad (\Phi \star \Psi)(E) = \int d\epsilon \Phi(E-\epsilon) \Psi(\epsilon) = \int d\epsilon \Phi(\epsilon) \Psi(E-\epsilon)$$

das Faltungsintegral ist.

Die Gleichung (4.64) ist eine Integralgleichung für $\Psi(E)$, sie besitzt im allgemeinen nur Lösungen $(E, \Psi(E))$ für spezielle Werte von E und unter bestimmten Voraussetzungen an die Potentiale V und Φ . (Die erlauben E -Werte bilden das Spektrum von $H(t)$). Die Beantwortung der außerordentlich schwierigen Frage über die explizite Form des Spektrums (diskret, kontinuierlich) müssen wir den Mathematikern überlassen.

Aus Gleichung (4.64) erhalten wir formal wie im Kapitel 3 (Glg. (3.31)) eine Lippmann-Schwinger-ähnliche Gleichung.

$$(4.66) \quad \Psi(E) = \chi(E) + (E_+ - (H_0 + V))^{-1} (\Phi \star \Psi)(E) \quad E_+ = E + i\eta; \eta = 0_+$$

mit

$$(4.67) \quad [(H_0 + V) - E] \chi(E) = 0$$

Wir können uns auch hier wieder wie im 3. Kapitel fragen, ob man einen Zusammenhang zwischen der zeitabhängigen Streutheorie, die sehr anschaulich ist, und der zeitunabhängigen Formulierung, wie wir sie auf Grund der Fouriertransformation der zeitabhängigen Theorie postulierten (Glg. (4.66)), herstellen kann. Dies ist in der Tat zumindest formal möglich. Dazu benötigen wir jedoch einige Vorüberlegungen: wenn wir die Lippmann-Schwinger-Gleichungen für zeitlich konstante Potentiale:

$$(4.68) \quad \psi_{\alpha+}(E) = \chi_{\alpha}(E) + (E_+ - (H_0 + V))^{-1} V \cdot \chi_{\alpha}(E) \quad E_+ = E + i\eta; \eta = 0_+$$

resp.

$$(4.69) \quad \psi_{\alpha+}(E) = \chi_{\alpha}(E) + (E_+ - (H_{\alpha} = H_0 + V - V_{\alpha}))^{-1} \cdot V_{\alpha} \psi_{\alpha+}(E)$$

betrachten (beide sind äquivalent: Taylor [1972]), so können wir die Gleichung (4.68) auffassen, als eine Abbildung, die den Zuständen χ_{α} die Zustände $\psi_{\alpha+}$ zuordnet (χ_{α} ist ein in-Zustand):

$$(4.70) \quad \psi_{\alpha+}(E) = \{1 + G_{\text{ret}}(E) \cdot V\} \chi_{\alpha}(E)$$

dagegen vermittelt die Gleichung (4.69) eine Abbildung der Menge aller Zustände $\psi_{\alpha+}$ des vollen Systems, auf die Menge der in-Zustände χ_{α} :

$$(4.71) \quad \chi_{\alpha}(E) = \{1 - G_{\text{ret}}(E) \cdot V_{\alpha}\} \psi_{\alpha+}(E)$$

Nun wissen wir, daß die Møller-operatoren stets asymptotische Zustände auf Zustände des vollen Systems abbilden, d.h. die Mølleroperatoren vermitteln Abbildungen vom Typus der Gleichung (4.70). Wir haben jedoch gesehen, daß man bei zeitlich variablen Potentialen nur eine L-S-Gleichung vom Typus der Gleichung (4.71) erwarten kann. Deswegen müssen wir, wenn wir einen Zusammenhang zwischen der zeitabhängigen und zeitunabhängigen Streutheorie für zeitlich variable Potentiale suchen, nicht von

$$(4.72) \quad \psi_{\alpha+}(t) = \Omega_{\alpha+}(t) \chi_{\alpha}(t)$$

sondern von

$$(4.73) \quad \chi_{\alpha}(t) = \Omega_{\alpha+}^{-1}(t) \psi_{\alpha+}(t)$$

ausgehen.

$\Omega_{\alpha\pm}^{-1}(t)$ läßt sich gemäß Glg. (4.54) darstellen. Wir erhalten somit:

$$(4.74) \quad \begin{aligned} \chi_{\alpha}(t_0) &= \psi_{\alpha\pm}(t_0) - i \int_{t_0}^{+\infty} ds U_{\alpha}^{-1}(s-t_0) V_{\alpha}(s) U(s, t_0) \psi_{\alpha\pm}(t_0) \\ &= \psi_{\alpha\pm}(t_0) - i \int_{t_0}^{+\infty} ds U_{\alpha}^{-1}(s-t_0) V_{\alpha}(s) \psi_{\alpha\pm}(s) \end{aligned}$$

Im folgenden beschränken wir uns der Einfachheit halber auf den Fall mit $\psi_{\alpha-}$. Wir erhalten dann durch Fouriertransformation der Glg. (4.74) speziell für $H_{\alpha} = H_0 + V$:

$$(4.75) \quad \begin{aligned} \chi_{\alpha}(E) &= \psi_{\alpha-}(E) - i \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 e^{iEt_0} \int_{t_0}^{+\infty} ds U_{\alpha}(t_0-s) \int d\varepsilon e^{-i\varepsilon s} \\ &\quad (\Phi \psi_{\alpha-})(\varepsilon) \\ &= \psi_{\alpha-}(E) - i \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 \int_{t_0}^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon e^{-i\varepsilon s} U_{\alpha}(t_0-s) (\Phi \psi_{\alpha-})(\varepsilon) \end{aligned}$$

Führen wir die Substitution $s' = s - t_0$, $ds = ds'$ durch, so erhalten wir:

$$(4.76) \quad \begin{aligned} \chi_{\alpha}(E) &= \psi_{\alpha-}(E) - i \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 \int_0^{\infty} ds' \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon e^{-i(H_{\alpha}-E)t_0} e^{-i(\varepsilon-H_{\alpha})s'} \\ &\quad e^{-i(\varepsilon-H_{\alpha})t_0} \cdot \psi_{\alpha-}(\varepsilon) \end{aligned}$$

Die Integration über t_0 liefert ein $\delta(E-\varepsilon)$, so daß wir

$$(4.77) \quad \chi_{\alpha}(E) = \psi_{\alpha-}(E) - i \int_0^{\infty} ds' e^{-i(E-(H_{\alpha}=H_0+V))s'} \Phi \cdot \psi(E)$$

erhalten. Die Integration über s' kann man wie in Kapitel 3 (Abschnitt b) durchführen, formal mit Hilfe der Distribution

$$(4.78) \quad \delta_+(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 dt e^{i\omega t} = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\omega - i\gamma}$$

Damit erhalten wir schließlich die formal hergeleitete Gleichung

$$(4.79) \quad \psi_{\alpha\pm} = \chi_{\alpha}(E) + G_{\text{ret}}(E) \cdot \hat{\Phi} \cdot \psi_{\alpha\pm}(E)$$

mit

$$(4.80) \quad G_{\text{ret}}(E) = (E + i\eta - H_0 - V)^{-1} \quad \eta = 0_+$$

Hätten wir oben ein allgemeineres H_{α} zugelassen, so hätten wir

$$(4.79a) \quad \psi_{\alpha\pm}(E) = \chi_{\alpha}(E) + (E + i\eta - H_{\alpha})^{-1} (\tilde{V}_{\alpha} \psi_{\alpha\pm}(E) + (\hat{\Phi} \cdot \psi_{\alpha\pm})(E))$$

erhalten. Im Spezialfall zeitlich konstanter Potentiale erhält man wegen $\hat{\Phi}(\varepsilon) = \delta(\varepsilon) \hat{\Phi}$ die Gleichung

$$(4.81) \quad \psi_{\alpha\pm}(E) = \chi_{\alpha}(E) + G_{\text{ret}}(E) \cdot \hat{\Phi} \cdot \psi_{\alpha\pm}(E)$$

d.h. die gewöhnliche L-S-Gleichung.

Die Tatsache, daß man als Spezialfall zeitlich konstanter Potentiale die gewöhnliche L-S-Gleichung erhält, zeigt, daß man die hier entwickelte Streutheorie als eine echte Erweiterung der üblichen Streutheorie auffassen kann.

Weil die verallgemeinerte L-S-Gleichung (4.79) noch sehr undurchsichtig ist, wollen wir einen Spezialfall eines zeitlich variablen Potentials betrachten. $\hat{\Phi}(t)$ soll von der Form

$$(4.82) \quad \hat{\Phi}(x, t) = \hat{\Phi}_+(x) e^{i\omega_+ t} + \hat{\Phi}_-(x) e^{-i\omega_- t} \quad \text{mit } \hat{\Phi}_+ = \hat{\Phi}_-^*$$

sein. Dann ergibt sich aus (4.79) wegen

$$(4.83) \quad \hat{\Phi}(\varepsilon) = \hat{\Phi}_+ \delta(\varepsilon + \omega_+) + \hat{\Phi}_- \delta(\varepsilon - \omega_-)$$

die Gleichung

$$(4.84) \quad \psi_{\alpha \pm}(E) = \chi_{\alpha}(E) + G(E \pm i\eta) \phi_{+} \cdot \psi_{\alpha}(E + i\omega) + G(E \pm i\eta) \phi_{-} \cdot \psi_{\alpha}(E - i\omega)$$

mit $G(E) = (E - H_0 - V)^{-1}$, $\eta = 0_{+}$.

Aus dieser Gleichung kann man die hinter dem Formalismus steckende Physik recht deutlich erkennen:

durch die Fouriertransformation auf eine bestimmte Energie beschreibt man innerhalb des Systems jene Prozesse, die als Ganzes betrachtet die Energie erhalten, denn den zweiten Term kann man als Beitrag (zu $\psi_{\alpha \pm}$) betrachten, der von einem Emissionsprozeß stammt (das System gibt wegen der Einwirkung der Störung ϕ_{+} einen Energiebetrag $\hbar\omega$ an seine Umgebung ab (z.B. durch Emission eines Lichtquants); der dritte Term beschreibt den Beitrag eines Absorptionsprozesses, bei dem die Umgebung (die man durch $\phi(t)$ berücksichtigt) wegen der Störung ϕ_{-} die Energie $\hbar\omega$ ans System abgibt (z.B. dadurch, daß das System, welches durch $H_0 + V$ beschrieben wird, ein Photon absorbiert).

Wir möchten jedoch folgendes hervorheben: oft interessiert man sich gerade für die Energieänderungen eines bestimmten Zustandes unter dem Einfluß einer best. Störung $\phi(t)$, d.h. man interessiert sich nicht dafür, wie ein Zustand des Systems zu einer best. Energie aussieht. Um solche Fragen beantworten zu können, muß man jedoch die Störung in Form einer Reihenentwicklung (etwa der Dyson-Reihe) untersuchen. Man erhält dann einen Zustand, der zu keiner festen Energie gehört, z.B. von der Form

$$(4.85) \quad \psi_{\alpha \pm}^{(E \pm i\eta)} = \chi_{\alpha}(E) + (E + i\eta - H_0 - V)^{-1} \phi_{-/\alpha}(E) + (E - i\eta - H_0 - V)^{-1} \phi_{+/\alpha}(E) + \text{Terme höher Ordnung in } \phi$$

(Wir werden bei der Diskussion der Born-Approximation bei der Photoemission nochmals darauf zurückkommen und obige Glg. (4.85) rechtfertigen). $\psi_{\alpha \pm}$ in (4.85) kann man keiner festen Energie zuordnen, da ein Term zur Energie (E), einer zu $E + \omega$, einer zu $E - \omega$ gehört (+ weitere Terme).

Der Vorteil der Fouriertransformation gegenüber der Reihenentwicklung gemäß (4.85) ist der, daß man geschlossene Ausdrücke für $\psi_{\alpha \pm}$ erhalten kann, während dies bei der Reihenentwicklung nicht möglich ist.

5. Resonsetheorie

Wir wollen in diesem Kapitel, an Kapitel 2 anknüpfend, mit Hilfe der in Kapitel 4 entwickelten Streutheorie für zeitlich variable Potentiale, nochmals auf die Resonsetheorie zurückkommen, um einzelne Fragen, die den limes $t \rightarrow -\infty$ betreffen, zu klären. Nachdem wir die Resonsetheorie formal korrekt formuliert haben, werden wir zeigen, daß die allgemeine Äquivalenz von Streu- und Resonsetheorie sich recht einfach ergibt. Zur Verdeutlichung des allgemeinen Ergebnisses, werden wir den Zusammenhang auf die lineare Response anwenden (den Fall der quadratischen Response werden wir im Kap. 6 im Zusammenhang mit der Photoemission genauer diskutieren).

a) Anknüpfung an Kapitel 2

Wir erwähnten in Kapitel 2 den üblichen Zugang zur Resonsetheorie über das Wechselwirkungsbild. Dabei gingen wir davon aus, daß sich das System durch einen reinen Zustand beschreiben läßt. Oft, insbesondere bei von Null verschiedenen Temperaturen, ist man jedoch gezwungen ein Gemisch, beschrieben durch eine Dichtematrix, zu betrachten. Wir wollen in einem Appendix 3 auf diese Behandlung zurückkommen und uns hier ausschließlich mit reinen Zuständen befassen. Dies erscheint uns deswegen gerechtfertigt zu sein, weil man Dichtematrizen stets als eine Kombination von ^{reinen} Zuständen (mit best. Gewichtungen ρ_n) auffassen kann.

Wie in Kapitel 2 erwähnt, taucht eine Schwierigkeit auf, wenn man in Gleichung (2.12) den limes $t_0 \rightarrow -\infty$ bilden will. Ein Argument, wieso man $\Psi(t_0 \rightarrow -\infty)$ durch $\chi_n = \chi(0) = \chi(E_n)$ ersetzen kann, stammt aus der Betrachtung der Schrödinger-Gleichung für den Zustand $\Psi_S(t)$ (Glg. (2.6)):

$$(5.1) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_S(t) = (H_0 + H^{\text{ext}}(t)) \Psi_S(t)$$

(wobei wir uns an die Notation von Kapitel 2 halten, d.h. H_0 beschreibt das ungestörte System mit Coulomb- und eventuell weiteren zeitunabhängigen Wechselwirkungen: H_0 ist gegeben durch Glg. (2.3), H^{ext} beschreibt die zeitabhängige Störung Glg. (2.4) + Glg. (2.5)).

Da wir verlangen, daß für $t \rightarrow -\infty$ die Wechselwirkung $H^{\text{ext}}(t)$ verschwindet, erhält man für $t \rightarrow -\infty$ die einfachere Schrödinger-Gleichung:

$$(5.2) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \psi_S(t) = H_0 \psi_S(t)$$

deren Lösung wir im Kapitel 2 (Glg. (2.14)) mit χ bezeichnet haben. Diese Betrachtung ist völlig korrekt. Der entscheidende Punkt ist nur der, daß man zwar damit zum Ergebnis gelangt, daß $\psi_S(t)$ und $\chi(t)$ für $t \rightarrow -\infty$ miteinander vergleichbar werden, aber eben nur im Sinne:

$$(5.3) \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi_S(t) - \chi(t)\| = 0$$

Wir dürfen jedoch nicht

$$(5.4) \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_S(t) = \chi_i(E_i) = \chi_i(t=0)$$

setzen, wie dies in Kapitel 2 (und in den dort zitierten Referenzen) gemacht wurde. Wir möchten besonders erwähnen, daß im Buch von Fetter und Walecka (Fetter-Walecka [1971]) ebenfalls auf diese Schwierigkeit hingewiesen wird, und ein formaler Zugang zur Resonsetheorie gegeben wird, der unserem äquivalent sein dürfte. Nur ist der dort gegebene Zugang nicht sehr klar. Wir wollen deswegen hier einen Zugang wählen, bei dem wir die Ergebnisse aus Kapitel 4 verwenden, denn die Gleichung (5.3) entspricht genau Glg. (4.31), die zur Einführung der Mølleroperatoren diene.

b) Formulierung der Resonsetheorie mit Hilfe der Mølleroperatoren

Da die Rechnungen in Kapitel 2 bis und mit Gleichung (2.12) formal korrekt sind, knüpfen wir an diese Gleichung an:

$$(5.5) = (2.12): \quad \psi_I(t) = T_{\text{exp}} \left\{ -i \int_{t_0}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \psi(t_0)$$

Wir wollen nun zeigen, wie man mit Hilfe der in Kapitel 4 für zeitlich variable Potentiale definierten Mølleroperatoren von (2.12) zu (2.14):

$$(5.6) = (2.14): \quad r_I(t) = T_{\exp} \left\{ -i \int_{t_0}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \chi(0)$$

gelangt. Betrachtet man nur den Zeitentwicklungsfaktor (Dysonreihe), so scheint der Übergang mit Hilfe von $t_0 \rightarrow -\infty$ möglich zu sein, betrachtet man jedoch den Zustand, auf den die Dysonreihe wirkt, so scheint es, daß in irgendeinem Sinne $t_0=0$ gesetzt werden sollte (mit einem H^{ext} -wf freien Zustand). Aus Kapitel 4 wissen wir, daß man einen Zusammenhang zwischen den wffreien und den vollen Zuständen mit Hilfe der Mølleroperatoren herstellen kann gemäß:

$$(5.7) \quad \Psi_S(t_0) = \Omega_+(t_0) \chi(t_0)$$

Diesen Zusammenhang benützen wir nun, um die Glg. (5.5) umzuformen. Dabei erweist es sich als vorteilhaft, die Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild nicht mit Hilfe der Dysonreihe (T-Produkt) zu beschreiben, sondern die Darstellung mit Hilfe von U_V und $U(t, t_0)$ zu benützen, gemäß:

$$(5.8) \quad U_I(t, t_0) = T_{\exp} \left\{ -i \int_{t_0}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} = U_V^{-1}(t-t_0) \cdot U(t, t_0)$$

(die Korrektheit dieser Gleichung wurde in Kapitel 4, Gleichungen (4.26) und (4.27) gezeigt).

Im weiteren lassen wir die Voraussetzung (2.7) ($H^{\text{ext}}(t) = 0$ für $t < t_0$) weg. Die Wechselwirkung soll lediglich die Bedingung

$$(5.9) \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} H^{\text{ext}}(t) = 0$$

erfüllen (diese Forderung ist etwas schwächer als die Bedingung (2.7)). Dadurch ist t_0 keine ausgezeichnete Zeit mehr.

Setzen wir (5.7) und (5.8) in (5.6) ein, so erhalten wir

$$(5.10) \quad \Psi_I(t) = U_V^{-1}(t-t_0) U(t, t_0) \Omega_+(t_0) \chi(t_0)$$

Dieser Ausdruck läßt sich mit Hilfe der Ergebnisse aus Kap. 4 umformen und vereinfachen: Benützt man die Intertwining Beziehung (4.34), so läßt sich das Produkt $U(t, t_0) \Omega_+(t_0)$ umschreiben als $\Omega_+(t) U_V(t-t_0)$:

$$\begin{aligned} (5.11) \quad \Psi_I(t) &= U_V^{-1}(t-t_0) U(t, t_0) \Omega_+(t_0) \chi(t_0) \\ &= U_V^{-1}(t-t_0) \Omega_+(t) U_V(t-t_0) \chi(t_0) \end{aligned}$$

In dieser Gleichung steht offenbar der in Kap. 4 genauer untersuchte Mölleroperator im Wechselwirkungsbild:

$$(5.12) \quad \Omega_I(t, t_0) = U_V^{-1}(t-t_0) \Omega_+(t) U_V(t-t_0)$$

Nun müssen wir noch zeigen, daß sich $\Omega_I(t, t_0)$ als Dyson-Reihe

$$\begin{aligned} (5.13) \quad \Omega_I(t, t_0) &= T_{\exp} \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(t_0, s) \right\}; \\ H_I^{\text{ext}}(t_0, s) &= U_V^{-1}(s-t_0) H^{\text{ext}}(s) U_V(s-t_0) \end{aligned}$$

schreiben läßt, denn damit wäre bewiesen, daß die Glg. (2.12) = (5.5) und die Glg. (2.14) = (5.6) identisch sind.

Zum Beweis von Glg. (5.13) benötigen wir einige Eigenschaften von (5.12)

$$1) \quad \Omega_I(t, t_0) \text{ ist isometrisch, d.h. } \Omega_I^\dagger \Omega_I = 1$$

dies sieht man wie folgt:

$$\begin{aligned} \Omega_I(t, t_0) \Omega_I^\dagger(t, t_0) &= (U_V^{-1} \Omega_+ U_V)^\dagger(t, t_0) (U_V^{-1} \Omega_+ U_V)(t, t_0) \\ &= (U_V^{-1} U \Omega_+)^\dagger(t, t_0) (U_V^{-1} U \Omega_+)(t, t_0) \\ &= \Omega_+^\dagger(t) U^{-1}(t, t_0) U_V(t-t_0) U_V^{-1}(t-t_0) U(t, t_0) \Omega_+(t) \\ &= \Omega_+^\dagger(t) \mathbb{1} \Omega_+(t) = P_{\text{in}} \end{aligned}$$

$$2) \quad s\text{-}\lim_{t \rightarrow -\infty} \Omega_I(t, t_0) = \mathbb{1}$$

denn:

$$\begin{aligned}\Omega_I(t, t_0) &= U_V^{-1}(t-t_0) \Omega_+(t) U_V(t-t_0) = U_V^{-1}(t-t_0) U(t, t_0) \Omega_+(t_0) \\ &= (U^{-1}(t, t_0) U_V^{-1}(t-t_0))^+ \Omega_+(t_0) \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{für } t \rightarrow -\infty\end{aligned}$$

$$3) \quad s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} \Omega_I(t, t_0) = S(t_0)$$

(dies folgt wie die Eigenschaft 2) mit Hilfe der Definition der S-matrix als $S(t_0) = \Omega_-^+(t_0) \Omega_+(t_0)$ mit $\Omega_-(t_0) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} U^{-1}(t, t_0) U_V(t-t_0)$.

Um nun zur Dyson-Reihe für $\Omega_I(t, t_0)$ zu gelangen, benützen wir das schon in Kap. 3 und 4 benutzte Verfahren:

$$\begin{aligned}(5.14) \quad \Omega_I(t, t_0) - \Omega_I(s, t_0) &= \int_s^t d\tau \frac{d}{d\tau} \Omega_I(\tau, t_0) \\ &= \int_s^t d\tau \frac{d}{d\tau} (U_V^{-1}(\tau-t_0) \Omega_+(\tau) U_V(\tau-t_0)) \\ &= \int_s^t d\tau \frac{d}{d\tau} (U_V^{-1}(\tau-t_0) U(\tau, t_0) \Omega_+(t_0)) \\ &= \int_s^t d\tau \{-i U_V^{-1}(\tau-t_0) H(t) U(\tau, t_0) \\ &\quad + i U_V^{-1}(\tau-t_0) H_V U(\tau, t_0) \Omega_-(t_0) U_V^{-1}(\tau-t_0)\} \\ &= \int_s^t d\tau (-i) U_V^{-1}(\tau-t_0) H^{\text{ext}}(\tau) U_V(\tau-t_0) \Omega_+(t_0) \\ &= \int_s^t d\tau (-i) U_V^{-1}(\tau-t_0) H^{\text{ext}}(\tau) U_V(\tau-t_0) U_V^{-1}(\tau-t_0) \\ &\quad \Omega_+(\tau, t_0) \Omega_+(t_0) \\ &= \int_s^t d\tau (-i) U_V^{-1}(\tau-t_0) H^{\text{ext}}(\tau) U_V(\tau-t_0) U_V^{-1}(\tau-t_0) \\ &\quad \Omega_+(\tau, t_0) \Omega_+(t_0) \\ &= \int_s^t d\tau (-i) H_I^{\text{ext}}(\tau) \Omega_I(\tau, t_0)\end{aligned}$$

bilden wir jetzt den limes $s \rightarrow -\infty$ und verwenden die Eigenschaft 2), so erhalten wir:

$$(5.15) \quad \Omega_I(t, t_0) = \mathbb{1} - i \int_{-\infty}^t d\tau H_I^{\text{ext}}(\tau) \Omega_I(\tau, t_0)$$

und daraus durch Iteration die Dyson-Reihe:

$$(5.16) \quad \Omega_I(t, t_0) = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\}$$

Einsetzen von (5.10) in (5.11) liefert das Ergebnis

$$(5.17) \quad \Psi_I(t) = \Omega_I(t, t_0) \chi(t_0) = T_{\exp} \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_I^{\text{ext}}(s) \right\} \chi(t_0)$$

Da in dieser Gleichung t_0 nicht mehr die Bedeutung einer Zeit hat, ab der die Ww $H^{\text{ext}}(t)$ eingesetzt (weil wir nur die schwächere Bed. (5.9) an $H^{\text{ext}}(t)$ gestellt haben) können wir ohne Beschränkung $t_0 = 0$ setzen. In diesem Falle wird die Gleichung (5.17) identisch mit der als Ausgangspunkt der Resonsetheorie dienenden Gleichung (2.14) = (5.6).

Daraus erkennt man, daß man nicht den Limes $t_0 \rightarrow -\infty$ zu betrachten hat. Dieser Limes würde eine Rolle spielen, wenn wir t_0 mit dem Auftreten der Störung $H^{\text{ext}}(t)$ in Verbindung bringen würden, wie dies in Kap. 2 der Fall war.

Somit konnten wir zeigen, wie man mit Hilfe der in Kap. 4 entwickelten Streutheorie an zeitlich variablen Potentialen zu einer formal sauberen Formulierung der Resonsetheorie gelangt.

c) Äquivalenz von Response- und Streutheorie

Da man die Resonsetheorie entwickelt hat, um die Antwort eines Vielteilchensystems auf eine äußere Störung zu untersuchen, wollen wir die Response einer allgemeinen Observablen O , die eventuell zeitlich variabel ist, auf eine externe Störung ^{Berechnen} Der allgemeine Ausgangspunkt der Berechnungen in der Resonsetheorie ist die Berechnung des Erwartungswertes

$$(5.18) \quad \langle O(t) \rangle^{\text{Resp.}} = \langle \tilde{\chi}(t) | \tilde{O}_{H_V}(t) | \tilde{\chi}(t) \rangle$$

wobei der Index H_V andeutet, daß die Operatoren im Heisenbergbild des ungestörten Systems: H_0 (H_0 gemäß Glg. (2.3))

$$(5.19) \quad |\tilde{\chi}(t)\rangle = T_{\exp} \left\{ -i \int_{-\infty}^t ds H_{H_V}^{\text{ext}} \right\} |\chi(0)\rangle$$

mit H^{ext} gemäß Glgn. (2.4) und Glg. (2.5) und χ gemäß

$$(5.20) \quad H_0 |\chi\rangle = E |\chi\rangle$$

zu berechnen sind. $\chi(0)$ wird in vielen Fällen der Grundzustand des Festkörpers sein, H_0 der entsprechende Hamiltonoperator.

Vergleichen wir die Gleichung (5.19) mit der Gleichung (5.17), so erkennen wir, daß beide identisch sind, d.h. $\Psi_I(t) = \tilde{\chi}(t)$. Die Vorschrift, daß alle Operatoren im Heisenbergbild des ungestörten Systems zu berechnen sind, ist identisch mit der Aussage, daß alle Operatoren im Wechselwirkungsbild zu betrachten sind, falls man beim Wechselwirkungsbild die externe Störung $H^{\text{ext}}(t)$ vom vollen System auf die übliche Weise abgespalten hat.

Daraus folgt aber, daß wir den Erwartungswert (5.18) auch schreiben können als

$$(5.21) \quad \langle O(t) \rangle^{\text{Resp.}} = \langle \tilde{\chi}(t) | O_I | \tilde{\chi}(t) \rangle = \langle \Psi_I(t) | O_I(t) | \Psi_I(t) \rangle \\ \langle \chi | \Omega_I^\dagger O_I \Omega_I | \chi \rangle \quad \text{gemäß (5.17)}$$

In der Streutheorie berechnet man im allgemeinen nicht den Erwartungswert irgend eines Observablen, sondern z.B. den Wirkungsquerschnitt. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist aber gegeben durch

$$(5.22) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\int_{\text{streu.}} d\vec{F}}{|\int_{\text{ein}}|}$$

Man kann deshalb als relevante Größe für ein Streuexperiment auch den Teilchenstrom $\vec{J}_{(+,+)}$ betrachten:

$$(5.23) \quad \vec{J}_{(+,+)} = \langle \Psi^{(+)}(t) | \vec{J} | \Psi^{(+)}(t) \rangle$$

oder allgemeiner, den Erwartungswert

$$(5.24) \quad \langle O(t) \rangle^{\text{Streu}} = \langle \Psi^{(+)}(t) | O_S(t) | \Psi^{(+)}(t) \rangle$$

(O_S = Observable im Schrödingerbild).

Schreiben wir $\Psi^{(+)}$ mit Hilfe der Mølleroperatoren, so folgt daraus die Äquivalenz von Streu- und Resonanztheorie (in bel. Ordnung bzgl. der äußeren Störung, unabhängig davon, ob diese zeitlich

variabel oder konstant ist) aus der Äquivalenz von Schrödinger- und Wechselwirkungsdarstellung unter der Voraussetzung, daß wir die Schwerpunktbewegung der Probe vernachlässigen, denn der Anfangszustand der Responsetheorie ist i.a. ein stationärer Zustand (z.B. der Grundzustand).

$$(5.25) \quad \chi_i^{\text{Response}} = \chi_i(E_i)$$

In der Streutheorie ist jedoch der Anfangszustand von der Form:

$$(5.26) \quad \chi_i^{\text{Streu}} = \chi_{\text{CM}}(\vec{p}_{\text{CM}}) \otimes \chi_i(E_i) = \chi_{\text{CM}}(\vec{p}_{\text{CM}}) \otimes \chi_i^{\text{Response}}$$

für $\vec{p}_{\text{CM}} = \vec{0}$ gilt somit

$$(5.27) \quad \chi_i^{\text{Streu}} = \chi_i^{\text{Response}} = \chi_i$$

Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned} (5.28) \quad \langle 0(t) \rangle^{\text{Response}} &= \langle \chi_1(0) | \Omega_I^+(t) O_I(t) \Omega_I(t) | \chi_1(0) \rangle \\ &= \langle \chi_1(0) | U_V^{-1}(t) \Omega_S^+(t) U_V(t) U_V^{-1} O_S(t) U_V(t) | \chi_1(0) \rangle \\ &= \langle \chi_1(t) | \Omega_S^+(t) 1/O_S(t) 1/\Omega_S(t) | \chi_1(t) \rangle \\ &= \langle \psi_S^{(+)}(t) | O_S(t) | \psi_S^{(+)}(t) \rangle \\ &= \langle 0(t) \rangle^{\text{Streu}} \end{aligned}$$

Durch die genauere Untersuchung über eine saubere Formulierung der Responsetheorie gelangten wir somit zu einer Form der Darstellung (mit Hilfe der Mølleroperatoren), aus der ihre allgemeine Äquivalenz mit der Streutheorie (im obigen Sinne) folgt.

Wir wollen noch zur Verdeutlichung den Spezialfall der lin. Response betrachten. Dies erscheint uns sinnvoll, weil die lin. Response (Kubo-Formel) von verschiedenen Leuten bereits genauer untersucht wurde und deswegen allgemein bekannt ist. Die quadratische Response, der eigentliche Ausgangspunkt der ganzen Betrachtungen, werden wir im nächsten Kapitel genauer diskutieren.

Der Stromerwartungswert ist in lin. Ordnung in $A^{\text{ext}}(t)$ gegeben durch

$$\begin{aligned}
 (5.29) \quad j_v^{(+)}(t) &= \langle \chi_0 | \hat{j}_v | \chi_0 \rangle + i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds \langle \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) \rangle_{H_v}(s) \langle \hat{j}_v | \chi_0 \rangle \\
 &\quad \cdot \left\{ | \chi_0 \rangle - i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds \langle \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) \rangle_{H_v}(s) | \chi_0 \rangle \right\} \\
 &= \langle \chi_0 | U_v^{-1}(t) \hat{j}_v U_v(t) | \chi_0 \rangle \\
 &\quad + i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_0 | U_v^{-1}(s) \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) U_v(s) U_v^{-1}(t) \hat{j}_v U_v(t) | \chi_0 \rangle \\
 &\quad - i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_0 | U_v^{-1}(t) \hat{j}_v U_v(t) U_v^{-1}(s) \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) U_v(s) | \chi_0 \rangle \\
 &\quad + O((\hat{A}^{\text{ext}})^2)
 \end{aligned}$$

Diese Formel lässt sich mit Hilfe von $\chi_t = U_v(t) \chi_0$ etwas vereinfachen:

$$\begin{aligned}
 (5.30) \quad j_v^{(+)}(t) &= \langle \chi_t | \hat{j}_v | \chi_t \rangle \\
 &\quad - i \frac{1}{c} \left\{ \langle \chi_t | \hat{j}_v \int_{-\infty}^t ds e^{i H_v(s-t)} \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) | \chi_s \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_s | \hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_v(s-t)} \hat{j}_v | \chi_t \rangle \right\}
 \end{aligned}$$

Die übliche Kubo-Formel erhält man aus (5.29) zu

$$(5.31) \quad j_v^{(+)}(t) = \langle \chi_t | \hat{j}_{Sv} | \chi_t \rangle + \frac{(+i)e}{c} \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_0 | [\hat{j}_v \hat{A}^{\text{ext}}(s)]_{H_v}(\tilde{s}) | \chi_0 \rangle$$

In diesen Formeln (Kubo-Formeln) ist der erste Term der Gleichgewichtserwartungswert des Stromes, der 2. Term definiert die lin. Leitfähigkeit. Mit Hilfe der Streutheorie aus Kap. 4 berechnet man $\Psi^{(+)}(t)$ in der Formel (5.24) resp. (5.23):

$$(5.32) \quad \Psi^{(+)}(t) = \Omega_S^{(+)}(t) \chi_S(t)$$

mit

$$(5.33) \quad \Omega_S^{(+)}(t) = 1 - i \int_{-\infty}^t ds U_V^{-1}(s-t) \frac{1}{c} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) U(s,t)$$

oder in Born-approximation (bei der man $U(s,t)$ durch $U_V(s-t)$ ersetzt):

$$(5.34) \quad \Omega_S^{(+)} \text{ Born}(t) = 1 - i \int_{-\infty}^t ds U_V^{-1}(s-t) \frac{1}{c} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) U_V(s-t)$$

Berechnen wir jetzt den Stromerwartungswert gemäß (5.23) resp. (5.24), so erhalten wir:

$$\begin{aligned} (5.35) \quad \dot{j}_V^{(1,2)}(t) &= \langle \chi_t | \{ 1 + i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_V(s-t)} \} \hat{j}_V \\ &\quad \{ 1 - i \frac{1}{c} \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_V(s-t)} \} | \chi_t \rangle \\ &= \langle \chi_t | \hat{j}_V | \chi_t \rangle \\ &\quad + i \frac{1}{c} \langle \chi_t | \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_V(s-t)} \hat{j}_V | \chi_t \rangle \\ &\quad - i \frac{1}{c} \langle \chi_t | \hat{j}_V \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_V(s-t)} | \chi_t \rangle \\ &\quad + O((\vec{A}^{\text{ext}})^2) \end{aligned}$$

Auch diese Formel läßt sich mit Hilfe der Beziehung $\chi_S = U_V(s-t) \chi_t$ vereinfachen zu:

$$\begin{aligned} (5.36) \quad \dot{j}_V^{(1,2)}(t) &= \langle \chi_t | \hat{j}_V | \chi_t \rangle \\ &\quad - i \frac{1}{c} \left\{ \langle \chi_t | \hat{j}_V \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) | \chi_S \rangle \right. \\ &\quad \left. - \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_S | \int \vec{A}^{\text{ext}}(s) e^{-i H_V(s-t)} \hat{j}_V | \chi_t \rangle \right\} \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist jedoch identisch mit der aus der Resonanztheorie gewonnenen Formel (5.30) (Kubo-Formel).

Daß der zweite Term in (5.36) tatsächlich reel ist ($j^{(1)}(t)$ ist eine Meßgröße) erkennt man aus folgender formalen Rechnung:

sei

$$\begin{aligned}
 (5.37) \quad M(i, f) &:= \langle \chi_t | \hat{j}_V \int_{-\infty}^t ds e^{i H_V(s-t)} \hat{j} \vec{A}^{ext}(s) | \chi_s \rangle \cdot (-\frac{i}{\epsilon}) \\
 &= M(f, i)^* = \frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^t ds \langle \chi_s | \hat{j} \vec{A}^{ext}(s) e^{-i H_V(s-t)} \hat{j}_V | \chi_t \rangle \\
 &= M_r(i, f) + i \cdot M_i(i, f)
 \end{aligned}$$

wobei M_r resp. M_i Real- resp. Imaginärteil des Matrixelements sind; dann läßt sich (5.36) schreiben als

$$\begin{aligned}
 (5.38) \quad j_V^{(1)}(t) &= \langle \chi_t | \hat{j}_V | \chi_t \rangle + M(i, f) + M(f, i) - \langle \chi_t | \hat{j}_V | \chi_t \rangle \\
 &\quad + M(f, i) + M(i, f)^* = \langle \chi_t | \hat{j}_V | \chi_t \rangle + 2 M_r(i, f)
 \end{aligned}$$

Da M_r reel ist, ist somit auch die Meßgröße $j^{(1)}$ reel (wie es sein muß).

6. Anwendung auf die Photoemission

In diesem Kapitel wollen wir den allgemeinen Formalismus der Vielkanalstreutheorie für zeitlich variable Potentiale auf die Photoemission anwenden, und nach einigen kurzen, eher theoretischen Bemerkungen (Abschnitt a)), die physikalischen Aussagen der Theorie betonen. Dabei interessieren wir uns auch für die Frage, wie sich die optischen Prozesse (Reflexion, Absorption, Transmission) im Formalismus ausdrücken.

a) Theoretische Bemerkungen zu $H(t)$, $U(r,s)$ und $\Omega(t_0)$

Wir wollen die Photoemission so einfach wie möglich beschreiben. Deswegen ist es sinnvoll, den Hamiltonoperator des Systems nicht unnötig kompliziert zu wählen. Wir werden uns deshalb in diesem Abschnitt mit dem auch bei Ehrenreich [Fermi-Lectures] verwendeten Operator beschäftigen:

$$(6.1a) \quad H(t) = \sum_{i,j} \frac{1}{2m_e} \left\{ \hat{p}_i - e \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right\}^2 + \sum_{i,j} V_{ij} + e \sum_i \varphi^{ext}(\vec{r}_i, t) \\ = H_V + H^{ext}(t)$$

Wir könnten jedoch auch den allgemeineren Operator:

$$(6.1b) \quad H(t) = \sum_i \frac{1}{2m_e} \left(\hat{p}_i - e \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right)^2 + e \sum_i \varphi(\vec{r}_i, t) + \sum_{i,j} V_{ij} \\ + \sum_i \frac{e \hbar^2}{2m_e c^2} \vec{S}_i \cdot \left(\vec{q}_i \cdot \nabla \varphi(\vec{r}_i, t) \wedge \hat{p}_i \right) - \frac{e \hbar^2}{m_e c} \vec{S}_i \cdot \left(\text{rot } \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right) \\ + \frac{1}{8c^2} \left[c^2 \vec{A}_i^2 \left\{ \vec{E}_i^2(\vec{r}_i, t)^2 + \vec{B}_i^2(\vec{r}_i, t)^2 \right\} \right]$$

betrachten (Entwicklung nach $1/c$ von der Diractheorie), dabei hängt

$$(6.2a) \quad \frac{e \hbar^2}{2m_e c^2} \vec{S}_i \cdot \left(\text{grad } \varphi(\vec{r}_i, t) \wedge \hat{p}_i \right)$$

mit der Spin-Bahnkopplung zusammen und

$$(6.2b) \quad - \frac{e \hbar^2}{m_e c} \vec{S}_i \cdot \vec{B}(\vec{r}_i, t)$$

beschreibt die magnetische Wechselwirkung (eines Spins mit dem Magnetfeld).

Um sinnvolle physikalische Voraussetzungen an $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ stellen zu können, wollen wir uns erst den Bestimmungsgleichungen dieser Felder zuwenden:

dazu wählen wir die Coulomb-Eichung

$$(6.3) \quad \text{div } \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = 0, \quad \text{grad } \varphi^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = 0$$

Die Maxwell-Gleichungen zur Bestimmung von $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ sind:

$$(6.4) \quad \square \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = 0$$

(zusammen mit bestimmten Randbedingungen).

Wir wollen uns vorstellen, daß das optische Feld z.B. von einem Laser stammt. In diesem Falle läßt sich $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ als Gaußpaket beschreiben.

Zur theoretischen Beschreibung der Photoemission reicht es aus, die "retardierte" Lösung der Maxwell-Gleichung (6.4) zu betrachten. In diesem Falle läßt sich $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ darstellen als:

$$(6.5) \quad \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = \int d^3k \left\{ \vec{A}(\omega_k, k) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x}_i - \omega_k t)} + \vec{A}(\omega_k, k)^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x}_i - \omega_k t)} \right\}$$

mit

$$(6.6) \quad A(\omega, k) = A^*(-\omega, -k)$$

$$(6.7)$$

(die "Retardierung" äußert sich hier explizit, wenn man die Welle $\exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{x}_i - \omega_k t)\}$ schreibt als $\exp\{i\omega_k[t - \frac{r}{c}]\}$; die "avancierte" Lösung entspricht der Welle $\exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{x}_i + \omega_k t)\}$ sowie der komplex konjugierten davon).

Die Feldenergie ist gegeben durch

$$(6.8) \quad \frac{1}{8\pi} \int d^3x_i \left\{ \vec{E}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)^2 + \vec{B}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)^2 \right\} =: E^{\text{ext}}$$

Den Integranden kann man umformen, unter Zuhilfenahme der Definition von $\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ und $\vec{B}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$

$$(6.9) \quad \vec{E}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$$

$$(6.10) \quad \vec{B}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) = \text{rot } \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$$

Dann erhält man für Glg. (6.8)

$$(6.11) \quad E^{\text{ext}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x_i \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \right)^2 + \int d^3k \left[\vec{A}(\omega, k, \vec{x}_i, t)^2 \omega^2 \right] \right\}$$

Daraus leitet man ab, daß man aus physikalischen Überlegungen (endliche Energiedichte der Strahlung) die Voraussetzungen

$$(6.12) \quad \int d^3x \quad \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t) \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t)^* < \infty$$

$$(6.13) \quad \int d^3x \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t) \right)^* < \infty$$

stellen kann. Zudem wissen wir, daß die Felder $\vec{E}^{\text{ext}}$ und $\vec{B}^{\text{ext}}$ als Funktionen der Zeit stetig sein müssen, jedoch nicht als Funktionen des Ortes.

In der Literatur findet man (Reed-Simon [1975]), daß man an $\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)$ die viel stärker einschränkende Voraussetzung

$$(6.14) \quad \int d^3x_i \quad \left[\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \right]^2 < \infty$$

stellen müßte, wollte man $H(t)$ als Operator (mit $H^{\text{ext}}(t)$ als Störung) beschreiben. Geht man jedoch zu quadratischen Formen über, die unserem Problem auch besser angepaßt sind, da der quantenmechanische Strom, der in

$$(6.15) \quad H^{\text{ext}}(t) = -\frac{1}{c} \sum_i \int d^3x_i \hat{j}(\vec{x}_i) \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \\ = -\frac{1}{c} \sum_i \left(\frac{e}{2m_e} \right) \left\{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \right\} - \frac{e^2}{2m_e c} \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t)^2 \}$$

$$(\{A, B\} = AB + BA)$$

explizit auftaucht, eine quadratische Form $\hat{J} = \hat{J}(\varphi, \varphi)$ ist. Allgemein kann man erwarten, daß man mit Hilfe der Methode der quadratischen Formen schwächere Voraussetzungen an die Potentiale stellen kann (Kato [1966]). Für unser spezielles Problem wird in Reed-Simon [1975] auch erwähnt, daß die Voraussetzungen an $\tilde{A}^{\text{ext}}(\vec{x}, t)$, die wir in (6.12) und (6.13) gestellt haben, ausreichen, um $H(t)$ sinnvoll definieren zu können (als quadrat. Form).

Wegen der vorausgesetzten Stetigkeit von $\tilde{E}^{\text{ext}}(\vec{x}_1, t)$ und $\tilde{B}^{\text{ext}}(\vec{x}_1, t)$ folgt auch, daß $U(t, s)$ wie in Kapt. 4 definiert werden kann.

Für die Mølleroperatoren konnte Simon ein Existenzkriterium für $\Omega_{\pm}(t)$ angeben, welches für jene Fälle gilt, bei denen die Kanalwechselwirkung V_{α} (hier also mind. $H^{\text{ext}}(t)$) als quadratische Form klein gegenüber dem Kanalhamiltonoperator H_{α} ist, in folgendem Sinne:

$$(6.16) \quad |V_{\alpha}(\varphi, \chi)| \leq a |\langle \varphi, H_{\alpha} \chi \rangle| + b |\langle \varphi, \chi \rangle| \quad \begin{matrix} 0 \leq a < 1 \\ 0 \leq b < \infty \end{matrix}$$

in unserem Fall also

$$(6.17) \quad |\dot{J}(\varphi, \chi) \tilde{A}^{\text{ext}} = -\frac{1}{2m} \frac{e}{c} [\langle \dot{\varphi}, \tilde{A}^{\text{ext}} \chi \rangle + \langle \tilde{A}^{\text{ext}} \varphi, \dot{\chi} \rangle - \frac{e}{c} \langle \tilde{A}^{\text{ext}} \varphi, \tilde{A}^{\text{ext}} \chi \rangle]| \\ \leq a_t |\langle \varphi, H_V \chi \rangle| + b_t |\langle \varphi, \chi \rangle|$$

mit $0 \leq a_t \leq 1; 0 \leq b_t \leq b < \infty$

Da diese Vor. in unserem Falle (nach Reed-Simon [1975]) erfüllt sind, können wir davon ausgehen, daß auch die Mølleroperatoren $\Omega_{\alpha\pm}(t)$ existieren. (Simon bewies tatsächlich ein allgemeineres Theorem, aus dem als Spezialfall die Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}$ für unser Problem folgt.)

Wir wollen uns mit diesen kurzen Bemerkungen zu diesen mathematisch sehr anspruchsvollen Untersuchungen begnügen. Sicher zeigen sie, daß es außerordentlich schwierig ist, die elektromagnetische Wechselwirkung theoretisch sauber in den Griff zu bekommen.

b) Born-Approximation: Photoemission als Streuung

Die Bornapproximation entspricht im Falle der Photoemission den 1 Photonenprozessen (in 2. Quantisierung). Wir werden jedoch in Abschnitt c) zeigen, daß dies nicht völlig korrekt ist. Der Grund dafür ist recht einfach: schreibt man die elektromagnetische Wechselwirkung explizit hin

$$(6.18) \quad H_i^{\text{ext}}(t) = -\frac{e}{2m_e c} \left\{ \rho_i, \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t) \right\}_+ + \frac{e^2}{2m_e c^2} (\vec{A}^{\text{ext}}(\vec{x}_i, t))^2$$

so sieht man sofort, daß der zweite Term proportional zur Intensität (also von 2. Ordnung) ist. Dieser quadratische Term trägt jedoch nichts zum externen Photostrom bei, wie sich zeigen wird (dies gilt nur in tiefster Ordnung).

Wir wollen uns nun kurz überlegen, inwiefern man die Photoemission als Streuung betrachten kann. Dazu konstruieren wir uns eine Apparatur, die den tatsächlich verwendeten im Großen und Ganzen entspricht:

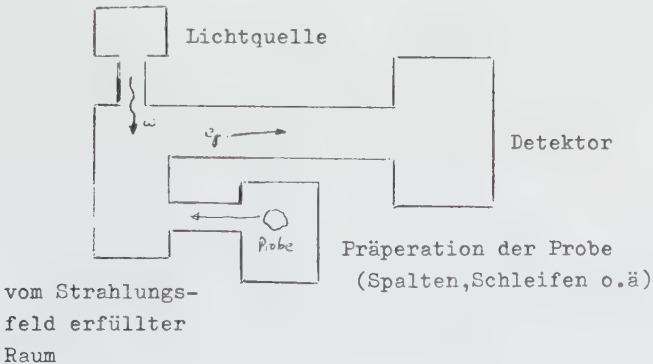


Fig. 6.1

In der Präparationskammer wird die Probe im Hochvakuum gespalten resp. gesäubert, damit man eine saubere Oberfläche erhält. Beim quantenmechanischen Streuexperiment entspricht dies der Präparation der Zustände (für $t \rightarrow -\infty$): χ_i .

Dann bringt man die Probe in den vom Strahlungsfeld $\vec{A}^{\text{ext}}$ erfüllten Raum. Bei der theoretischen Beschreibung entspricht dies jenem Bereich innerhalb dessen man das System durch $H(t)$ resp. $U(t, t_0)$ beschreiben muß. In diesem Bereich wird die Probe angeregt bzw. ein oder mehrere Photoelektronen aus der Probe emittiert ($\vec{A}^{\text{ext}}$ braucht noch nicht wieder vernachlässigbar zu sein).

Schließlich mißt man z.B. den differentiellen Wirkungsquerschnitt resp. den Photostrom, d.h. den el. Strom der Photoelektronen und holt die Probe wieder aus der Apparatur heraus bzw. in die Präparationskammer. Dies deuten wir als das Verhalten für $t \rightarrow +\infty$ bei einem Streuexperiment.

Weil wir nur die Photoelektronen, nicht jedoch auch noch die Probe, nach dem Emissionsprozeß analysieren, messen wir eine Größe wie $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ und nicht etwas $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2}$, bei der $d\Omega_1$ dem Photoelektron und $d\Omega_2$ der Probe entsprechen würde. Im letzteren Falle müßten wir die Probe nach dem Emissionsprozeß auch genauer untersuchen. Dies ist jedoch nicht von Interesse und im allgemeinen wird man etwa durch Elektronenzufuhr auch dafür sorgen, daß die Probe beim Experiment nicht übermäßig aufgeladen wird (wegen der Elektronenemission), so daß es auch keinen Sinn hätte, nach dem Zustand der Probe nach dem Emissionsprozeß zu fragen, da die Probe ja durch verschiedene Zusatzeinrichtungen noch gestört wurde.

Die Bornapproximation läßt sich aus dem allgemeinen Formalismus aus Kap. 4 herleiten, wenn wir die dort hergeleitete Integraldarstellung für den Mølleroperator verwenden. Wir führen deshalb die Rechnung zuerst innerhalb des zeitabhängigen Formalismus durch.

Auf Grund des oben skizzierten idealisierten Experimentes, können wir die Photoemission als Potentialstreuung am zeitlich variablen Potential $V_\alpha = H^{\text{ext}}(t)$ (im einfachsten Falle in Bezug auf die Kanalwv V_α) betrachten. Die Integraldarstellung für $\Omega_{\alpha+}(t)$ lautet:

$$(6.19) \quad \Omega_{\alpha+}(t) = M^{-1} \int_{-\infty}^t ds \, U^{-1}(s, t) H^{\text{ext}}(s) U_{\alpha}(s, t)$$

mit

$$(6.20) \quad U_{\alpha}(s, t) = e^{-i \int_s^t H_v(s, t) dt}$$

$$(6.21) \quad H_v = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i,j} V_{ij} =: H_{\alpha}$$

Um den Term linear in H^{ext} zu erhalten, ersetzen wir $U(s, t)$ durch $U_{\alpha}(s, t)$:

$$(6.22) \quad \Omega_{\alpha+}^{\text{Born}}(t) = M^{-1} \int_{-\infty}^t ds \, U_{\alpha}^{-1}(s, t) H^{\text{ext}}(s) U_{\alpha}(s, t)$$

Wie man aus (6.22) erkennt, enthält der Operator die komplizierte Dynamik $U(t, s)$ in diesem Falle überhaupt nicht mehr. Dies hat zur Folge, daß wir, um zur zeitunabhängigen Formulierung zu gelangen, sowohl die Methode aus Kapitel 3 als auch jene aus Kapitel 4, die, wie wir in Kapt. 4 bereits betonten, in diesem Falle (weil das Streupotential zeitlich variabel ist) einander nicht äquivalent sind. Wir wollen hier deswegen beide Methoden anwenden, um die Unterschiede erkennen zu können.

Formal werden wir im Folgenden annehmen, daß $\chi_{\alpha} = \chi_i$ ein stationärer Zustand sei. Daß dies leicht auf nichtstationäre Zustände verallgemeinert werden kann, wurde bereits in Kap. 3 beim Übergang von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Formulierung der Streutheorie erwähnt. Wir erhalten dann durch Anwendung von (6.22) auf $\chi_i = \chi_{\alpha}(t)$

$$(6.23) \quad \Omega_{\alpha+}^{\text{Born}}(t) = \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^t ds \, e^{-i \int_s^t H_v(s, t) dt} H^{\text{ext}}(s) e^{-i \int_s^t H_{\alpha}(s, t) dt} \chi_{\alpha}(t)$$

Wegen der Stationarität von χ_{α} läßt sich der Ausdruck unter dem

Integral vereinfachen zu:

$$\begin{aligned}
 (6.24) \quad \Psi_{\alpha+}^{Z_{clm}}(t) &= \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^t ds e^{i H_{\alpha}(s-t)} H^{\text{ext}}(s) e^{-i E_{\alpha}(s-t)} \chi_{\alpha}(t) \\
 &= \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} e^{i H_{\alpha} \tilde{s}} H^{\text{ext}}(\tilde{s}+t) e^{-i E_{\alpha} \tilde{s}} \chi_{\alpha}(t) \quad (\tilde{s}=s-t) \\
 &= \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} e^{i (H_{\alpha} - E_{\alpha}) \tilde{s}} H^{\text{ext}}(\tilde{s}+t) \chi_{\alpha}(t)
 \end{aligned}$$

Um das Zeitintegral berechnen zu können, setzen wir die explizite Form von H^{ext} gemäß Glg. (6.18) mit $\tilde{A}^{\text{ext}}$ gemäß Glg. (6.5) in Glg. (6.24) ein:

$$\begin{aligned}
 (6.25) \quad \Psi_{\alpha+}^{Z_{clm}}(t) &= \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} e^{i (H_{\alpha} - E_{\alpha}) \tilde{s}} H^{\text{ext}(1)}(\tilde{s}+t) \chi_{\alpha}(t) \\
 &\quad - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} e^{i (H_{\alpha} - E_{\alpha}) \tilde{s}} H^{\text{ext}(2)}(\tilde{s}+t) \chi_{\alpha}(t)
 \end{aligned}$$

wobei $H^{\text{ext}}(1)$ der in $\tilde{A}^{\text{ext}}$ lineare, $H^{\text{ext}}(2)$ der in $\tilde{A}^{\text{ext}}$ quadratische Anteil zu H^{ext} sind. Den Term proportional zu $H^{\text{ext}}(2)$ werden wir im folgenden Abschnitt c) eingehender diskutieren, da er zwar der Bornapproximation in H^{ext} entspricht, jedoch proportional zur Intensität des Strahlungsfeldes ist und der Photostrom $j^{\text{ext}} = j(\psi_{\alpha+}^{\text{Born}}, \psi_{\alpha+}^{\text{Born}})$ Erfahrungsgemäß über einen weiten Energiebereich proportional zur Intensität ist, so daß der $H^{\text{ext}}(2)$ -Term für diesen Prozeß (in niedrigster Ordnung) nicht in Frage kommt, denn die Terme

$$(6.26) \quad j^{\text{ext}(2)} = \int (\chi_{\alpha}(t), -i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} e^{i (H_{\alpha} - E_{\alpha}) \tilde{s}} H^{\text{ext}(2)}(\tilde{s}+t) \chi_{\alpha}(t))$$

und der komplex konjugierte Term gehen wegen $\chi_{\alpha}(t)$ im allgemeinen exponentiell mit dem Abstand von der Probe gegen Null ($E_{\alpha} < 0$).

Führen wir nun den Übergang zur zeitunabhängigen Formulierung gemäß Kap. 3 durch, so brauchen wir nur das Zeitintegral des $H^{\text{ext}}(1)$ -Termes in Glg. (6.25) auszuführen:

$$\begin{aligned}
 (6.27) \quad \mathcal{U}_{\alpha+}^{\text{Born}}(t) &= \chi_{\alpha}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} \int d^3k \mathcal{Z}_i \left[\left(\frac{-e}{2m_e c} \right) e^{i(H_{\alpha} - E_{\alpha})\tilde{s}} e^{-i\omega_k \tilde{s}} \{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(k, \omega_k) \}_+ \right. \\
 &\quad \left. \cdot e^{-i\omega_k t} + e^{i(H_{\alpha} - E_{\alpha})\tilde{s} + i\omega_k \tilde{s}} \{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(k, \omega_k) \}_+ e^{i\omega_k t} \right] \chi_{\alpha}(t) \\
 &= \chi_{\alpha}(t) + \mathcal{Z}_i \left(-\frac{e}{2m_e c} \right) \int d^3k \underset{\eta \downarrow 0+}{(-i \lim_{\eta \downarrow 0+} (i(H_{\alpha} - E_{\alpha} - \omega_k - i\eta))^{-1})} \{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(k, \omega_k) \}_+ \\
 &\quad \cdot e^{-i\omega_k t} \chi_{\alpha}(t) \\
 &\quad + \mathcal{Z}_i \left(-\frac{e}{2m_e c} \right) \int d^3k \underset{\eta \downarrow 0+}{(-i \lim_{\eta \downarrow 0+} (i(H_{\alpha} - E_{\alpha} + \omega_k - i\eta))^{-1})} \{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(k, \omega_k) \}_+ e^{i\omega_k t} \chi_{\alpha}(t) \\
 &= \chi_{\alpha}(t) + \int d^3k G_{\text{ret}}(E_{\alpha} + \omega_k) H_+^{(1)}(k, \omega_k; t) \chi_{\alpha}(t) \\
 &\quad + \int d^3k G_{\text{ret}}(E_{\alpha} - \omega_k) H_-^{(1)}(k, \omega_k; t) \chi_{\alpha}(t)
 \end{aligned}$$

(H_+^{ext} resp. H_-^{ext} entsprechen den Anteilen, die proportional zu $e^{-i\omega_k t}$ resp. $e^{i\omega_k t}$ sind). Zu bemerken wäre, daß wir an Stelle der Wellenpakete für A^{ext} gemäß Glg. (6.5) auch Wellenpakete der Form $\int d\omega A_k(\omega) \dots$ hätten betrachten können.

Glg. (6.27) läßt sich wie folgt deuten:

nach der Störung besteht das System aus dem ungestörten Zustand $\chi_{\alpha}(t)$, sowie dem den Prozeß der Emission von $h\omega_k$ beschreibenden Term $G_{\text{ret}}(E - h\omega_k) H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega, t) \chi_{\alpha}(t)$. Der Term $G_{\text{ret}}(E + \omega_k) H_+^{\text{ext}}(k, \omega, t) \cdot \chi_{\alpha}(t)$ beschreibt die Absorption eines Energiequantes $h\omega_k$ (alles in 1. Ordnung).

Wir wollen nun noch den Übergang gemäß Kap. 4, d.h. mit Hilfe der Fouriertransformation, durchführen. Ausgangspunkt der Rechnung ist wieder die Glg. (6.25) (wobei wir wieder den $H^{\text{ext}(2)}$ -Beitrag weglassen). Da das Zeitintegral $\int_{-\infty}^t ds$ resp. $\int_{-\infty}^0 d\tilde{s}$ wieder genau wie in Glg. (6.27) durchgeführt werden kann, können wir direkt Glg. (6.27) nach Fourier transformieren:

$$\begin{aligned}
 (6.28) \quad \mathcal{F}_{t \rightarrow E} (\mathcal{U}_{\alpha+}^{\text{Born}}(t)) &= \mathcal{F}_{t \rightarrow E} (\chi_{\alpha}(t)) \\
 &\quad + \int d^3k G_{\text{ret}}(E_{\alpha} + \omega_k) H_+^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt - i\omega_k t} \chi_{\alpha}(t) \\
 &\quad + \int d^3k G_{\text{ret}}(E_{\alpha} - \omega_k) H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt + i\omega_k t} \chi_{\alpha}(t)
 \end{aligned}$$

Die Zeitintegrale liefern unter der Vor. der Stationarität von

$$\chi_{\alpha} = \chi_i$$

$$\text{im Term mit } H_+^{\text{ext}(1)}: \quad \delta(E - E_i - \omega_K)$$

$$\text{im Term mit } H_-^{\text{ext}(1)}: \quad \delta(E - E_{\alpha} + \omega_K)$$

Das Auftreten dieser δ -Funktionen hängt damit zusammen, daß der Anfangszustand zu einer best. Energie E_{α} gehört. In Kap. 4 betrachteten wir allgemeine Anfangszustände. Die Gleichung (6.28) ist somit nur sinnvoll, wenn wir

$$\text{im Term mit } H_+^{\text{ext}(1)} \quad E_{\alpha} \text{ durch } E - \omega_K$$

$$\text{im Term mit } H_-^{\text{ext}(1)} \quad E_{\alpha} \text{ durch } E + \omega_K$$

ersetzen (also die Substitutionen $E_{\alpha} + \omega_K + i\eta \rightarrow E + i\eta$ resp. $E_{\alpha} - \omega_K + i\eta \rightarrow E + i\eta$ vornehmen).

Wir erhalten dann aus Glg. (6.28):

$$(6.29) \quad \psi_{\alpha}^{\text{Born}}(E) = \chi_{\alpha}(E) + \int d^3k G_{\alpha}(E) H_+^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) \chi_{\alpha}(E - \omega_k) \\ + \int d^3k G_{\alpha}(E) H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) \chi_{\alpha}(E + \omega_k)$$

Diese Gleichung hätten wir genauso gut aus der verallgemeinerten L-S-Gleichung aus Kap. 4 gewinnen können, indem wir dort auf der rechten Seite der Glg. für $\psi_{\alpha}^{(+)}(E)$ jeweils $\psi_{\alpha}^{(+)}(E \pm \omega)$ durch $\chi_{\alpha}(E \pm \omega)$ ersetzt hätten. Die hier gegebene Herleitung ist jedoch instruktiver, da man etwas mehr Einblick in den allgemeinen Formalismus erhält.

Man erkennt auch, daß die beiden Zugänge konsistent sind:

in beiden Fällen wird durch $H_+^{\text{ext}(1)}(k, \omega)$ ein Übergang zu einer höheren Energie, durch $H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega)$ ein Übergang zu einer tieferen Energie beschrieben.

Bisher haben wir uns erst mit der Berechnung des Zustandes beschäftigt. Wir wollen uns nun noch mit der Berechnung experimentell zugänglicher Größen beschäftigen:

die eine Möglichkeit besteht darin, den Stromerwartungswert im gestörten Zustand Glg. (6.25) zu berechnen. Wichtig ist dabei nur der zweite Term, da der erste zur Energie E_{α} gehört, die i.a. so tief liegt, daß die Wellenfunktion $\chi_{\alpha}(E_{\alpha})$ exponentiell abfällt außerhalb des Festkörpers, d.h. $\chi_{\alpha}(E_{\alpha})$ überlebt die

Asymptotik $R \rightarrow \infty$ nicht. Den die Emission von $h\omega_k$ beschreibenden Anteil in $H_{\text{ext}}^{(2)}$ können wir ebenfalls weglassen. Eine experimentell relevante Größe wäre folglich

$$\begin{aligned}
 (6.30) \quad j_{\text{asympt.}}^{\text{ext}(2)}(t) &= \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \langle \chi_n(t) | e^{-iH_n(t-s_1)} H_+^{\text{ext}(1)}(s_1) e^{iH_n(t-s_2)} \\
 &\quad \cdot \int_s e^{-iH_n(t-s_2)} H_+^{\text{ext}(1)}(s_2) e^{iH_n(t-s_2)} | \chi_n(t) \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \langle \chi_n(s_1) | H_+^{\text{ext}(1)}(s_1) e^{-iH_n s_1} \int_{H_n}^1(t) e^{iH_n s_2} H_+^{\text{ext}(1)}(s_2) | \chi_n(s_2) \rangle
 \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist mit dem in Glg. (2.25) aus der Resonsetheorie hergeleiteten identisch, wenn wir die Glg. (2.25) auf reine Zustände spezialisieren.

An Stelle von Glg. (6.25) können wir jedoch auch Glg. (6.27) verwenden, da diese beiden Gleichungen äquivalent sind:

$$\begin{aligned}
 (6.31) \quad j_{\text{asympt.}}^{\text{ext}(2)}(t) &= \langle \chi_n(t) | \int d^3k [H_+^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) e^{-i\omega_k t}]^* G_{\text{au}}(E_n + \omega_k) \\
 &\quad \cdot \int_s d^3k' G_{\text{nt}}(E_n + \omega_{k'}) H_+^{\text{ext}(1)}(k', \omega_{k'}) e^{-i\omega_{k'} t} | \chi_n(t) \rangle \\
 &= \int d^3k \int d^3k' \langle \chi_n(E_n) | H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) G_{\text{au}}(E_n + \omega_k) \int_s \\
 &\quad \cdot G_{\text{nt}}(E_n + \omega_{k'}) H_+^{\text{ext}(1)}(k', \omega_{k'}) | \chi_n(E_n) \rangle \\
 &\quad \cdot e^{iE_n t} e^{i\omega_k t} e^{-i\omega_{k'} t} e^{-iE_n t} \\
 &= \int d^3k \int d^3k' \langle \chi_n(E_n) | H_-^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k) G_{\text{au}}(E_n + \omega_k) \int_s G_{\text{nt}}(E_n + \omega_{k'}) H_+^{\text{ext}(1)}(k', \omega_{k'}) | \chi_n(E_n) \rangle \\
 &\quad \cdot e^{i(\omega_k - \omega_{k'}) t}
 \end{aligned}$$

Falls wir das elektromagnetische Potential durch eine ebene Welle approximieren können, erhalten wir somit wegen $\omega_k = \omega_{k'}$ das Ergebnis, daß der Photostrom zeitlich konstant ist (für stationäre Anfangszustände).

Bevor wir die physikalischen Prozesse diskutieren, die durch den Term $H^{\text{ext}(2)}(t)$ beschrieben werden (Abschnitt c)), wollen wir die Mehrkanalstruktur der Photoemission eingehender untersuchen.

Aus unserem schematischen Experimentaufbau folgt, daß wir die in-Asymptotik ($\lim_{t \rightarrow -\infty}$) stets durch den Hamiltonoperator des ungestörten Festkörpers (d.h. ohne elektromagnetische Störung) H_V beschreiben können. Hinzu kommt eigentlich noch die Bewegung des Schwerpunktes (Schwerpunktimpuls $\vec{p}_{CM}$). Diese benötigen wir, um den Festkörper ins Strahlungsfeld zu bringen. Diese Schwerpunktbewegung tritt bei allen Streuexperimenten auf. Da sie in der folgenden Rechnung nicht mehr explizit gebraucht wird, wollen wir sie nicht mehr stets explizit erwähnen. Deswegen identifizieren wir im Folgenden H_{in} mit H_V :

$$(6.32) \quad H_{in} = H_V = H_0 + V = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i,j} V_{ij}$$

Die Kanalwechselwirkung V_α ist somit im Eingangskanal gegeben durch

$$(6.33) \quad V_{in} = H^{\text{ext}}(t) = - \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N \left\{ \hat{p}_i, \vec{A}^{\text{ext}}(\vec{r}_i, t) \right\}_+ + \frac{1}{2m_e} e^2 \sum_{i,j=1}^N \left[A^{\text{ext}}(\vec{r}_i, t) \right]^2 \\ = H^{\text{ext}(A)}(t) + H^{\text{ext}(B)}(t) \quad (\{A, B\}_+ = AB + BA)$$

Der in- oder Anfangszustand ist somit gegeben durch $\chi_{in} = \chi_\alpha$ (wobei wir die Schwerpunktbewegung, die z.B. durch ein Gaußpaket beschrieben werden könnte, wie oben erwähnt weglassen). χ_α ist somit eine Lösung der Gleichung

$$(6.34) \quad H_V \chi_\alpha = E_\alpha \chi_\alpha$$

(χ_α könnte also der Grundzustand des Festkörpers sein). Im in-Kanal haben wir somit nur ein Fragment. Den zu diesem Kanal gehörigen Zustand $\psi_{\alpha+}$ haben wir in Glg. (6.27) in Born-Approximation berechnet.

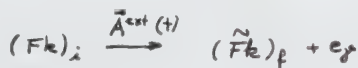
Nach dem in-Kanal kommen wir nun zur Diskussion des out-Kanals. Eine solche Diskussion wird üblicherweise innerhalb der Response-

theorie nicht durchgeführt. Sie ist jedoch typisch für eine Streutheorie. Hier liegt der eigentliche Vorteil der Streutheorie gegenüber der Resonsetheorie, denn dadurch gelangt man erst zu genaueren Aussagen über die Zustände $\psi_{\alpha+}$, wogegen man in der Resonsetheorie nicht den Zustand, sondern die Korrelationsfunktionen, im Falle der quadratischen Resonsetheorie die 3-Stromkorrelationsfunktion:

$$(6.35) \quad \langle \hat{f} \hat{A}^{\text{ext}} \hat{f}(R \rightarrow r) \hat{f} \hat{A}^{\text{ext}} \rangle = \langle \hat{f} \hat{f}(R \rightarrow r) \hat{f} \rangle \hat{A}^{\text{ext}} \hat{A}^{\text{ext}}$$

untersucht. Als erstes wollen wir nun jenen out-Kanal betrachten, bei dem $H_{\text{out}} = H_{\text{in}} = H_V$ ist. In diesem Falle betrachtet man die Photoionisation als Übergang vom Zustand $\chi_i(E_i)$ (zu H_{in}) in den angeregten Zustand $\chi_f(E_f)$. Da im allgemeinen wegen der Zeitabhängigkeit von $H^{\text{ext}}(t) = V_{\alpha}$ die Energie E_f und die Energie E_i voneinander verschieden sein werden, haben wir zwar nur ein Fragmentkanal (beschrieben durch H_V), jedoch verschiedene Streukanäle (wegen der verschiedenen Energie). Falls der Energieübertrag ω_k groß genug ist, wird χ_f zum kontinuierlichen Spektrum von H_V gehören, d.h. das angeregte Teilchen kann den Festkörper verlassen. Bei zu geringem Energieübertrag wird der Festkörper nur angeregt. Bei sehr hohen Frequenzen ω_k kann es vorkommen, daß mehr als ein Elektron emittiert wird. Zwar ist die elektromagnetische Wechselwirkung eine Einteilchenwechselwirkung; aber im Falle sehr starker Korrelationen zwischen den Elektronen, kann es vorkommen, daß gleichzeitig mehrere z.B. 2 Elektronen emittiert werden. Es handelt sich dabei um einen Effekt, der innerhalb einer Rechnung mit unabhängigen Teilchen völlig verschwindet. Es erschien deswegen interessant, neben der Einteilchen- auch die Zweiteilchenemission genauer zu betrachten.

Falls wir uns für jene Prozesse interessieren, bei denen sich mindestens 1 Elektron vom Bulk löst, d.h. betrachten wir eine Reaktion der Form



(wobei $(Fk)_i$ der Festkörper im Grundzustand, $(Fk)_f$ der 1fach positiv aufgeladene Festkörper im Endzustand f, e_{γ} das Photoelektron

sein sollen), dann ist der out-Kanal gegeben durch:

$$(6.36) \quad H_{out} = H(t) - V_{out}(t) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_i^2}{2m_0} + \sum_{i,j} V_{ij} + \frac{\vec{p}_{e,f}^2}{2m_0}$$

$$(6.37) \quad V_{out}(t) = H^{ext}(t) + \sum_{i,j} V_{ij} = H^{ext}(t) + \tilde{V}_{out}$$

Wir haben dabei die Unterscheidbarkeit der Teilchen, wie dies in der Vielkanalstreutheorie üblich ist (Taylor [1972]), vorausgesetzt und das Photoelektron mit dem N-ten Elektron identifiziert. Bei der Kanalwechselwirkung tritt neben der elektromagnetischen Ww noch ein Zusatzterm auf, der die Ww des Photoelektrons mit dem angeregten und einfach positiv aufgeladenen Festkörper ($\hat{F}k$)_f beschreibt. Diese Ww ist, zumindest asymptotisch für große Abstände, die Bildkraft. Für große Entfernungen verhält sie sich wie $\frac{1}{r}$, da der Festkörper für große Entfernungen wie eine Punktladung (+e) wirkt. Da man üblicherweise bei Photoemissions-experimenten dafür sorgt, daß sich der Festkörper nicht aufladet, ist dieses Verhalten evtl. nicht von Bedeutung. Die Beschreibung von $\tilde{V}_{out}$ erweist sich im allgemeinen als ausgesprochen schwierig (Peuckert [1971], Duke et al. [1972]). Wir wollen nun den Zustand $\psi_{\alpha+}^{Born}$ wie in der Vielkanalstreutheorie üblich (Taylor [1972]), nach dem out-Kanal entwickeln. Dabei benützen wir folgende Resolventengleichung:

$$(6.38) \quad G_{\alpha}(E) = (E - H_{\alpha})^{-1} = (E - H_P)^{-1} + (E - H_P)^{-1} (V^A - V^P) (E - H_{\alpha})^{-1} \\ = G_P + G_P (V^A - V^P) G_{\alpha}$$

Setzen wir diese Entwicklung von G_{in} nach G_{out} in der Glg. (6.27) ein, so erhalten wir gemäß Taylor [1972]

$$(6.39) \quad \psi_{\alpha+}^{(4-1)}(t) = \int d^3k \, G_{\alpha+}^A(E_{\alpha} + \omega_k) V^A(k, \omega_k, t) \psi_{\alpha+}^{Born}(t) + \Delta \psi$$

wobei der Term $\Delta \psi$ die Anteile enthält, die orthogonal zu Kanal β sind. Da die Ww im out-Kanal: V_{β} (die Ww die für $t \rightarrow +\infty$ fehlt), noch den Term H^{ext} enthält, ist die Glg. (6.39) von höherer als 1. Ordnung. Um den Beitrag niedrigster Ordnung in $\vec{A}^{ext}$ zu erhalten, entwickeln wir (6.39) nach Potenzen von $\vec{A}^{ext}$ und nehmen nur

den Term mit, der die Absorption beschreibt:

$$\begin{aligned}
 (6.40) \quad \psi_{k+}^{(a)}(t) &= G_{k+}^{\text{out}} V_{k+}^{\text{out}} \psi_{k+}^{\text{Bohr}}(t) \\
 &= G_{k+}^{\text{out}} V_{k+}^{\text{out}} (\chi_{\text{in}}(t) + G_{k+}^{\text{in}} H_+^{\text{ext}} \chi_{\text{in}}(t)) \\
 &= G_{k+}^{\text{out}} (H_+^{\text{ext}(1)} + \tilde{V}^{\text{out}}) (\chi_{\text{in}}(t) + G_{k+}^{\text{in}} H_+^{\text{ext}(1)} \chi_{\text{in}}(t)) \\
 &= G_{k+}^{\text{out}} \tilde{V}^{\text{out}} \chi_{\text{in}}(t) + G_{k+}^{\text{out}} \tilde{V}^{\text{out}} G_{k+}^{\text{in}} H_+^{\text{ext}(1)} \chi_{\text{in}}(t) \\
 &\quad + G_{k+}^{\text{out}} H_+^{\text{ext}(1)} \chi_{\text{in}}(t) + G_{k+}^{\text{out}} H_+^{\text{ext}(1)} G_{k+}^{\text{in}} H_+^{\text{ext}(1)} \chi_{\text{in}}(t)
 \end{aligned}$$

In dieser Gleichung überlebt der 1. Term die Asymptotik nicht, da er keinen Absorptionsterm $H_+^{\text{ext}(1)}$ enthält, falls die Anfangsenergie E_{in} nicht höher als die Photoemissionsschwellenenergie ist. Der letzte Term ist von höherer Ordnung bezüglich $\tilde{A}^{\text{ext}}$. Wir erhalten somit für die Einteilchenemission:

$$\begin{aligned}
 (6.41) \quad \psi_{k+}^{(a)}(t) &= \int d^3k G_{k+}^{\text{out}} (E_{\text{in}} + \omega_k) \tilde{V}^{\text{out}} G_{k+}^{\text{in}} (E_{\text{in}} + \omega_k) H_+^{\text{ext}(1)}(t) \chi_{\text{in}}(t) \\
 &\quad + \int d^3k G_{k+}^{\text{out}} (E_{\text{in}} + \omega_k) H_+^{\text{ext}(1)}(t) \chi_{\text{in}}(t)
 \end{aligned}$$

Da jedoch beide Terme den Faktor

$$(6.42) \quad H_+^{\text{ext}(1)} \chi_{\text{in}}(t)$$

gemeinsam haben, könnten wir Glg. (6.41) vereinfachen zu

$$\begin{aligned}
 (6.43) \quad \psi_{k+}^{(a)}(t) &= \int d^3k \left\{ G_{k+}^{\text{out}} (E_{\text{in}} + \omega_k) \tilde{V}^{\text{out}} G_{k+}^{\text{in}} (E_{\text{in}} + \omega_k) \right. \\
 &\quad \left. + G_{k+}^{\text{out}} (E_{\text{in}} + \omega_k) \right\} H_+^{\text{ext}(1)}(k, \omega_k; t) \chi_{\text{in}}(t)
 \end{aligned}$$

Der Ausdruck in der Klammer ist aber gerade G_{in}^{ret} , denn

$$(6.44) \quad (E - H_{in})^{-1} = (E - H_{out})^{-1} + (E - H_{out})^{-1} (H_{in} - H_{out}) (E - H_{in})^{-1}$$

und

$$(6.45) \quad H_{in} - H_{out} = (H - H_{out}) - (H - H_{in}) = V_{out} - V_{in} \\ = H^{ext}(t) + \tilde{V}_{out} - H^{ext}(t) - \tilde{V}_{in} = \tilde{V}_{out} - \tilde{V}_{in}$$

Daraus erkennt man, daß man direkt im asymptotisch überlebenden Zustand

$$(6.46) \quad \psi_{A+}^{asympt}(t) = \int d^3k G_A(E_{in} + \omega_k + i\eta) H^{ext(A)}(k, \omega_k; t) \chi_{in}(t)$$

die Green'sche Funktion G_A nach dem gewünschten Kanal entwickeln kann, um das korrekte Ergebnis zu erhalten.

Die Zerlegung der Green'schen Funktion gemäß Glg. (6.43) führte zur Einführung des LEED-Zustandes in die Theorie der Photoemission (Adawi [1964]):

$$(6.47) \quad G_{out}^{out} + G_{out}^{out} \tilde{V}_{out} G_{in}^{in} \rightarrow \frac{e^{i k_{er} R_{er}}}{R_{er}} \chi_F^+ \left\{ \langle \psi_{LEED} | x \rangle = e^{-i k_{er} R_{er}} \chi_F^- + \langle \chi_F | 0 \rangle \langle \chi_F | \tilde{V}_{out} G_{in}^{in} \right\}$$

man hat eine einlaufende ebene Welle $\exp(-i \vec{k}_{eY} \cdot \vec{y})$ die auf den Festkörper χ fällt und einen reflektierten Term $G_{av}^{in} \tilde{V}_{in} \chi_{eY} \otimes \dots$

Die analoge Entwicklung beim Fall der 2-Elektronenemission führt zur Einführung eines 2-Elektronen-LEED-Zustandes: man betrachtet zwei einlaufende Elektronen, die am Festkörper gestreut werden. Versucht man nun etwa die Winkelverteilung dieser 2 emittierten Elektronen zu berechnen, so stößt man auf außerordentliche Schwierigkeiten. Experimentell dürfte der Effekt leichter zu beobachten sein: man müßte mit 2 Detektoren $\frac{d^2 G}{d\Omega_1 d\Omega_2}$ als Funktion des Winkels der Emission und des Zwischenwinkels der beiden Detektoren untersucht und prüfen, ob sich bestimmte Korrelation zeigen.

Innerhalb der Resonsetheorie wird man im Fall der 2-Elektronenemission auf die Untersuchung der 4-Stromkorrelation:

$$(6.48) \quad \langle \hat{A}^{\text{ext}} \hat{f}(R_1 \rightarrow \infty) \hat{f}(R_2 \rightarrow \infty) \hat{A}^{\text{ext}} \rangle = \langle \hat{f}(R_1) \hat{f}(R_2) \hat{f} \rangle \hat{A}^{\text{ext}} \hat{A}^{\text{ext}}$$

geführt. Hier zeigt sich deutlich, daß die Streutheorie zu einer großen Vereinfachung der Rechnungen führen kann. Denn die Streutheorie untersucht direkt den relevanten Zustand (sein asymptotisches Verhalten). Neben dem Zugang zu experimentell relevanten Größen mit Hilfe der Berechnung des Photostromes, kann man sich auch noch überlegen, daß die externe Intensität des Elektronenwellenfeldes, d.h. des Quadrates der Wellenfunktion des Photoelektrons, außerhalb des Festkörpers durchaus von experimenteller Relevanz ist, da diese Größe ein Maß für die Anzahl der Photoelektronen darstellt.

Im Allgemeinen interessiert man sich jedoch bei einem Experiment nur für bestimmte Größen, wie die Energie- und Winkelverteilung der Photoelektronen. Es ist deshalb naheliegender, nicht $\psi_{\alpha+}^{\text{Born}}, \text{scattered} \langle \psi | \hat{A}^{\text{ext}} \rangle$ auf einen Unterraum $|\Lambda\rangle$, der zu best. Winkelvariablen, einer best. Energie und eventuell weiteren Variablen (einem vollständigen System von Observablen, im Idealfall) gehört, zu betrachten.

Deswegen kann man die Größe

$$(6.49) \quad I^{\text{ext}}(\Lambda) = |\langle \Lambda | \psi_{\alpha+}^{\text{Born}} \rangle|^2$$

als physikalisch relevante Größe berechnen.

Diese Größe läßt sich umformen und führt zu einem Ausdruck, der sich bedeutend rationeller als z.B. die Goldene Regel mit Hilfe von Rechnern berechnen läßt (falls wir $\hat{A}^{\text{ext}}$ als ebene Welle idealisieren)

$$\begin{aligned} (6.50) \quad I^{\text{ext}}(\Lambda) &= \sum_i |\langle \Lambda | G_{\text{ext}}(E_i, \omega) H_{\text{ext}}^{\text{ext}(\Lambda)} | \chi_i(E_i) \rangle|^2 \\ &= \int dE_i \rho(E_i) \langle \Lambda | G_{\text{ext}}(E_i, \omega) H_{\text{ext}}^{\text{ext}(\Lambda)} | \chi_i \rangle \langle \chi_i | H_{\text{ext}}^{\text{ext}(\Lambda)} G_{\text{ext}}(E_i, \omega) | \Lambda \rangle \\ &= -\frac{i}{\pi} \int_{\omega} \text{Im} \langle \Lambda | G_{\text{ext}}(E_i + \omega) H_{\text{ext}}^{\text{ext}(\Lambda)} G_{\text{ext}}(E_i) H_{\text{ext}}^{\text{ext}(\Lambda)} G_{\text{ext}}(E_i + \omega) | \Lambda \rangle \end{aligned}$$

Glg. (6.50) lässt sich graphisch mit Hilfe von Diagrammen darstellen. In 0-ter Ordnung bezüglich V_{ij} erhält man Fig. 6.2.

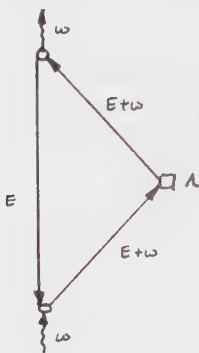


Fig. 6.2

Ein Ergebnis von dieser Art erhält man auch durch Störungsentwicklung der allgemeinen Formel für den Photostrom Glg. (6.31). Dieses Ergebnis wurde von verschiedenen Leuten, z.B. Caroli et al. [1973], Hermeking [1972] mit Hilfe verschiedener Formalismen hergeleitet (als Einteilchennäherung).

Ein Spezialfall der Methode, die in Glg. (6.50) beschrieben wird, wurde von Pendry [1976] bei der expliziten Berechnung der Photoemission aus einem halbumendlichen Kristall (mit Hilfe der Einteilchennäherung) benutzt.

c) Optik und Photoemission

In diesem Abschnitt geht es darum, den Wechselwirkungsanteil $H^{\text{ext}(2)}$ zu diskutieren und zugleich die Photoemission gegen die optischen Prozesse Transmission und Reflexion abzugrenzen.

Diese physikalische Diskussion kann man entweder durchführen, indem man die Erwartungswerte der Energie und des Impulses berechnet. Denn bei der Reflexion einer elektromagnetischen Welle mit dem Wellenvektor $\vec{k}$ wird auf die Probe der Impuls $\Delta p = 2\hbar\vec{k}$ ($\hbar=1$) übertragen.

Bei der Berechnung der Erwartungswerte stößt man (wegen Divergenzen) auf Schwierigkeiten. Es erwies sich deswegen als einfacher, diese Probleme analog zum Energieaustausch (Absorption resp. Emission von $\hbar\omega_k$), wie er in Abschnitt b) behandelt wurde, zu behandeln.

Es erweist sich als sinnvoll, neben dem Wellenpaket

$$(6.51) \quad \bar{A}_-(\vec{r}_i, t) = \int d^3k \left\{ \bar{A}_-(k, \omega_k) e^{i(\vec{k}\vec{r}_i - \omega_k t)} + \bar{A}_-(k, \omega_k)^* e^{-i(\vec{k}\vec{r}_i - \omega_k t)} \right\}$$

auch ein Wellenpaket der Form

$$(6.52) \quad \bar{A}_+(\vec{r}_i, t) = \int d^3k \left\{ \bar{A}_+(k, \omega_k) e^{i(\vec{k}\vec{r}_i + \omega_k t)} + \bar{A}_+(k, \omega_k)^* e^{-i(\vec{k}\vec{r}_i + \omega_k t)} \right\}$$

mitzunehmen. Den Grund dafür erkennt man aus der klassischen Theorie der Reflexion (Born [1972]): eine reflektierte Welle zeigt zwar immer noch die selbe Zeitabhängigkeit ($e^{\pm i\omega_k t}$) wie die einlaufende Welle, aber der Wellenvektor ändert sich von $\vec{k}$ zu $\pm\vec{k}$. Wenn wir nun zum vornherein eine solche Welle mitnehmen, zeigt es sich, daß die physikalische Diskussion besonders einfach wird. Die eigentliche Motivation für dieses Vorgehen stammt aus der klassischen Theorie der Reflexion. Diese wird beschrieben durch die Formeln:

$$(6.53) \quad \vec{E}_{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \vec{E}_e e^{i(\omega t - \frac{\omega}{c} \vec{e}_k \vec{r})} = \vec{E}_e e^{i\omega(t - \frac{\vec{e}_k \vec{r}}{c})}$$

für die einfallende Welle, sowie durch

$$(6.54) \quad \vec{E}_{\text{refl.}}(\vec{r}, t) = \vec{E}_r e^{i(\omega t + \frac{\omega}{c} \vec{e}_k \vec{r})} = \vec{E}_r e^{i\omega(t + \frac{\vec{e}_k \vec{r}}{c})}$$

für die reflektierte Welle und schließlich durch

$$(6.55) \quad \vec{E}_{\text{trans.}}(\vec{r}, t) = \vec{E}_t e^{i(\omega t - \frac{\omega}{c} \vec{e}_k \vec{r})} = \vec{E}_t e^{i\omega(t - \frac{\vec{e}_k \vec{r}}{c})}$$

für die transmittierte Welle. Da der Faktor $t - \frac{\vec{r}}{c}$ stets einer 'Retardierung' entspricht (retardierte Lösung) und der Faktor $t + \frac{\vec{r}}{c}$ wie er in Glg. (6.54) auftritt, einer 'Avancierung' (avancierte Lösung) erkennt man aus dieser Behandlung, daß es evtl. sinnvoll sein könnte, als elektromagnetische Störung das Feld

$$(6.56) \quad \vec{A}_{\text{Tot}}(\vec{x}_i, t) = \vec{A}_-(\vec{x}_i, t) + \vec{A}_+(\vec{x}_i, t)$$

mit $\vec{A}_\pm(\vec{x}, t)$ gemäß (6.51) resp. (6.52), zu betrachten. Die "retardierte" Lösung bewegt sich in Richtung $+\vec{k}$, die "avancierte" Lösung in Richtung $-\vec{k}$, weil aus

$$(6.57) \quad \varphi = \text{const.} = t \mp \frac{c|\vec{x}|}{c}$$

die Gleichungen

$$(6.58) \quad \frac{d\varphi}{dt} = 0 = 1 \mp \frac{c|\vec{v}|}{c} \quad d\vec{h} \quad v = \pm c$$

folgen (man erhält hier eine best. Analogie mit der Antiteilchentheorie der Quantenfeldtheorie als zeitlich rücklaufende Teilchen).

Der Einfachheit halber wollen wir zusätzlich verlangen, daß $\vec{A}(t)$ am Schwerpunkt der Probe angreift. Dies erleichtert die Berechnung des Impulsübertrages.

Weil sich $\vec{A}(t)$ in diesem Abschnitt von jenem in Abschnitt b) durch $\vec{A}_+(t)$ unterscheidet, wollen wir kurz den Term proportional zu $H^{(1)}(t)$, den wir in Abschnitt b) mit $H^{\text{ext}(1)}(t)$ bezeichnet haben, und der in lin. Ordnung für den Photoeffekt verantwortlich ist, diskutieren und uns vorallem für den Impulsübertrag interessieren. Da wir voraussetzten, daß $\vec{A}(t)$ am Schwerpunkt angreift, nehmen wir die Schwerpunktbewegung wieder explizit mit. Sie sei beschrieben durch ein Wellenpaket der allgemeinen Form:

$$(6.59) \quad \varphi_{\vec{k}_0}(\vec{x}_{cm}) = \int d^3k_{cm} f(k_{cm}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0) \cdot \vec{x}_{cm}}$$

mit

$$(6.60) \quad \int d^3k f(k) f(k)^* < \infty$$

Setzt man nun den modifizierten Wvterm $H^{(1)}(t)$ in Glg. (6.21) ein, so lassen sich die Zeitintegrale genauso ausführen, wie mit $H^{\text{ext}(1)}(t)$. Wir wollen dabei die Energie der Schwerpunktbewegung

in E_α berücksichtigen, da wir uns hier primär für den Impulsübertrag interessieren:

$$(6.61) \quad \psi_{\alpha+}^{\text{Born}}(t) = \chi_\alpha(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha + \omega_k) H_{A+}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) \\ + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha - \omega_k) H_{A-}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t)$$

mit

$$(6.62) \quad H_{A+}^{(1)}(t) = H_{A+}^{(1)} := - \frac{e}{2Mc} \int d^3k \left\{ \hat{p}_{cm} \left[\hat{A}_+^*(\omega_k, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_{cm}} + \hat{A}_-(\omega_k, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_{cm}} \right] \right\}_+ e^{-i\omega_k t}$$

$$(6.63) \quad H_{A-}^{(1)}(t) = H_{A-}^{(1)} := - \frac{e}{2Mc} \int d^3k \left\{ \hat{p}_{cm} \left[\hat{A}_+(\omega_k, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_{cm}} + \hat{A}_-(\omega_k, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_{cm}} \right] \right\}_+ e^{i\omega_k t}$$

Den Impulsübertrag erhalten wir, indem wir die Ortsintegrale über die Schwerpunktskoordinate ausführen:

$$(6.64) \quad \psi_{\alpha+}^{\text{Born}}(t) = \chi_\alpha(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) \\ + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha + \omega_k) H_{A+}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \cdot \int d^3x_{cm} \int d^3k_{cm} e^{i\vec{k}_{cm} \cdot \vec{x}_{cm}} f(\vec{k}_0 - \vec{k}_{cm}) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{x}_{cm}} \\ + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha + \omega_k) H_{A-}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \int d^3x_{cm} \int d^3k_{cm} f(\vec{k}_0 - \vec{k}_{cm}) e^{i\vec{k}_{cm} \cdot \vec{x}_{cm}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_{cm}} e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{x}_{cm}} \\ + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha - \omega_k) H_{A+}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \int d^3x_{cm} \int d^3k_{cm} f(\vec{k}_0 - \vec{k}_{cm}) e^{i(\vec{k}_{cm} + \vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{x}_{cm}} \\ + \int d^3k G_{\alpha+}(E_\alpha - \omega_k) H_{A-}^{(1)}(t) \chi_\alpha(t) \int d^3x_{cm} \int d^3k_{cm} f(\vec{k}_0 - \vec{k}_{cm}) e^{i(\vec{k}_{cm} - \vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{x}_{cm}}$$

wobei wir zur Abkürzung die Größen $H_{\pm\pm}^{(1)}(t)$ eingeführt haben, die folgende Abhängigkeit von $\vec{x}_{CM}$ resp. t haben:

$$(6.65) \quad H_{\pm\pm}^{(1)}(\vec{x}_{CM}, t) \sim e^{\mp i(\vec{k} \cdot \vec{x}_{CM} - \omega_k t)}$$

(retardierter Anteil) resp.:

$$(6.66) \quad H_{\pm\mp}^{(1)}(\vec{x}_{CM}, t) \sim e^{\mp i(\vec{k} \cdot \vec{x}_{CM} + \omega_k t)}$$

(avancierter Anteil).

In Glg. (6.64) lassen sich die Integrale über $\vec{x}_{CM}$ (nach einigen Vertauschungen der Integrationsreihenfolge, die hier problemlos sind) ausführen und liefern

$$\begin{aligned} \text{im 2. Term:} & \quad \delta(\vec{k} - \vec{k}_{CM} + \vec{k}_O^{CM}) \\ \text{im 3. Term:} & \quad \delta(\vec{k} + \vec{k}_{CM} - \vec{k}_O^{CM}) \\ \text{im 4. Term:} & \quad \delta(\vec{k} + \vec{k}_{CM} + \vec{k}_O^{CM}) \\ \text{im 5. Term:} & \quad \delta(\vec{k} - \vec{k}_{CM} + \vec{k}_O^{CM}) \end{aligned}$$

Schematisch lassen sich die Terme 2)-5) deswegen, und unter Beachtung der Tatsache, daß die Lösung mit $\omega t + \vec{k} \cdot \vec{x}$ in Richtung $-\vec{k}$ läuft, wie in den Fig. (6.3)-(6.6) dargestellt, interpretieren.

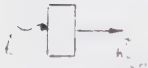


Fig. 6.3

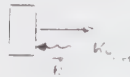


Fig. 6.4



Fig. 6.5



Fig. 6.6

Die Figuren entsprechen der Reihe nach den Termen H_{++} , H_{+-} , H_{-+} , H_{--} (die ersten beiden Terme entsprechen der Absorption, die beiden letzten der Emission einer Welle). Fig. (6.5) soll z.B. bedeuten, daß die Probe die Energie $\hbar\omega_k$ abstrahlt und zwar in Vorwärtsrichtung bezüglich ihrer Schwerpunktsbewegung. Man erkennt aus diesen Figuren auch, daß das Strahlungsfeld $\vec{A}_-$ nach rechts, das Strahlungsfeld $\vec{A}_+$ nach links läuft. Wir können die Fig. auch so interpretieren, daß die Fig. (6.3) die Photoemission beschreibt

mit Hilfe einer von links einlaufenden Strahlung, während Fig. (6.4) den Prozeß mit Hilfe einer von rechts einlaufenden Welle beschreibt.

Bis hier brachte die Miteinbeziehung der Lösung $\vec{A}_+$ keine wesentlich neuen Erkenntnisse über das Verhältnis von Optik und Photoemission. Dies ändert sich jedoch bei der Diskussion des $(\vec{A})^2$ -Termes $H^{(2)}(t)$:

$$\begin{aligned}
 (6.67) \quad \vec{A}^2(\vec{r}_M, t) = & \int d^3k_1 \int d^3k_2 \left\{ \vec{A}_-(k_1, \omega_1) \vec{A}_-(k_2, \omega_2) e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 + \omega_2)t} \right. \\
 & + \vec{A}_-(k_1, \omega_1) \vec{A}_+^*(k_2, \omega_2) e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 - \omega_2)t} \\
 & + \vec{A}_-(k_1, \omega_1) \vec{A}_+(k_2, \omega_2) e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 + \omega_2)t} \\
 & + \vec{A}_-(k_1, \omega_1) \vec{A}_+^*(k_2, \omega_2) e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 - \omega_2)t} \\
 & + \dots \\
 & + \vec{A}_+^*(k_1, \omega_1) \vec{A}_+^*(k_2, \omega_2) e^{-i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 + \omega_2)t} \\
 & \left. + \vec{A}_+^*(k_1, \omega_1) \vec{A}_+(k_2, \omega_2) e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_{CM} - i(\omega_1 - \omega_2)t} \right\}
 \end{aligned}$$

(insgesamt erhält man also 16 Terme).

Wir wollen nun nicht alle 16 Terme berechnen, sondern uns auf einige typische beschränken:

$$(6.68) \quad \mathcal{U}_{\alpha+}^{(2)}(t) = \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} \frac{e^2}{2\hbar c^2} e^{i(\hbar_{\alpha} - E_{\alpha})\tilde{s}} \vec{A}^2(\vec{s}+t) \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t)$$

Als erstes betrachten wir den Term mit $\vec{A}_- \vec{A}_-$: das Zeitintegral liefert den Energieübertrag

$$\begin{aligned}
 (6.69) \quad \mathcal{U}_{\alpha+}^{(2)}(t) = & \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) - i \int_{-\infty}^0 d\tilde{s} \frac{e^2}{2\hbar c^2} e^{i(\hbar_{\alpha} - E_{\alpha})\tilde{s}} \\
 & \cdot \int d^3k_1 \int d^3k_2 \vec{A}_-(k_1, \omega_1) \vec{A}_-(k_2, \omega_2) \\
 & \cdot e^{-i(\omega_1 + \omega_2)(t + \tilde{s})} \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) \\
 = & \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t) + \int d^3k_1 \int d^3k_2 G_{M\alpha}(E_{\alpha} + \omega_{k_1} + \omega_{k_2}) \frac{e^2}{2\hbar c^2} \vec{A}_-(k_1) \vec{A}_-(k_2) e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} \chi_{\alpha}(t) \otimes \varphi_{\alpha_0}(t)
 \end{aligned}$$

Das Integral über die Schwerpunktbewegung liefert den Impulsübertrag

$$(6.70) \int d^3x_{CM} e^{i(\vec{U}-\vec{U}_0)\vec{x}_{CM}} e^{i(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\vec{x}_{CM}} = \delta(\vec{U}-\vec{U}_0 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2)$$

Schematisch läßt sich dieser Term durch Fig. (6.7) darstellen:



Fig. (6.7)

Der Schwerpunktimпульs erhöht sich um $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$ während die Energie um $\omega_{k_1} + \omega_{k_2}$ zunimmt, d.h. dieser Prozeß entspricht einer Zweiphotonenabsorption.

Als zweiten Term betrachten wir jenen mit $\vec{A}_+ \vec{A}_+$:

$$(6.71) \mathcal{U}_{A_+}^{(2)}(t) = \chi_A(t) \otimes \varphi_{A_0}(t) + \int d^3k_1 \int d^3k_2 G_{kt}(E_A - \omega_{k_1} - \omega_{k_2}) \frac{e^2}{2M c^2} \vec{A}_+ \vec{A}_+ \cdot e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2})t} \chi_A(t) \otimes \varphi_{A_0}(t)$$

während das Ortsintegral über $\vec{x}_{CM}$

$$(6.72) \int d^3x_{CM} e^{i(\vec{U}-\vec{U}_0)\vec{x}_{CM}} e^{i(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\vec{x}_{CM}} = \delta(\vec{U} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{U}_0)$$

liefert. Dieser Term sieht schematisch wie in Fig. (6.8) dargestellt aus:



Fig. (6.8)

Beim Term mit $\vec{A}_+ \vec{A}_-$ liefert das Zeitintegral

$$(6.73) G_{kt}(E_A - \omega_{k_1} + \omega_{k_2})$$

während das Ortsintegral

$$(6.74) \quad \delta(\vec{r}-\vec{r}_0 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2)$$

liefert. Fig. (6.9) zeigt schematisch, daß dieser Term eine Reflexion beschreibt.



Fig. (6.9)

Schließlich liefert beim Term mit $\vec{A}_- \vec{A}_-^*$ das Zeitintegral

$$(6.75) \quad G_{nt} (E_d + \omega_1 - \omega_2)$$

und das Ortsintegral

$$(6.76) \quad \delta(\vec{r}-\vec{r}_0 - \vec{k}_1 + \vec{k}_2)$$

Wie man aus Fig. (6.10) erkennt, entspricht dieser Term formal der Transmission der Strahlung (Transmission durch den Schwerpunkt, da $\vec{A}$ am Schwerpunkt angreift).



Fig. (6.10)

Die verschiedenen Terme in Glg. (6.67) lassen sich wie folgt klassifizieren:

$\vec{A}_-$ liefert stets Absorption und Impulsübertrag $+\vec{k}$:	
$\vec{A}_-^*$ liefert stets Emission und Impulsübertrag $-\vec{k}$:	
$\vec{A}_+^*$ liefert stets Emission und Impulsübertrag $+\vec{k}$:	
$\vec{A}_+$ liefert stets Absorption und Impulsübertrag $-\vec{k}$:	

Die verschiedenen Terme sind in Tab. 1 nochmals zusammengestellt. Dabei haben wir in den gemischten Fällen, wie etwa $\vec{A}_+ \vec{A}_-$ den Term $\vec{A}_- \vec{A}_+$ weggelassen. Man erhält die dem zweiten Term entsprechenden Impuls- und Energieübertragung in diesen Fällen durch Vertauschung der Indices ($E+\omega_1-\omega_2$ geht über in $E-\omega_1+\omega_2$).

Wir haben bei unseren Rechnungen das Strahlungsfeld stets durch ein Wellenpaket dargestellt. Im allgemeinen werden diese Pakete nur in einem bestimmten engen Bereich bezüglich $\vec{k}$ von Null verschieden sein. Deswegen wird im allgemeinen $A(k) A(k')$ näherungsweise einem Produkt $A(k_0) A(k_0) = A(k_0)^2$ gleich sein. Dies ist insbesondere der Fall, wenn wir zu ebenen Wellen übergehen. In diesem Falle erhalten wir die bei der Diskussion der einzelnen Terme angegebene physikalische Interpretationen als Absorption von 2ω , Emission von 2ω , Reflexion resp. Transmission.

Daß die optische Reflexion und Transmission Effekte zweiter Ordnung in $\vec{A}$ sind, läßt sich auch mit Hilfe des Photonenbildes leicht verstehen: bei der Reflexion muß erst ein Photon absorbiert und dann gleich wieder emittiert werden. (Aus dem Energienenner folgt auch, daß bei der Reflexion keine Elektronen emittiert werden können: der Zustand geht exponentiell gegen Null für großes $\vec{k}_e$).

Tabelle 1: Klassifikation und physikalischer Inhalt der $(A(x,t))^2$ -Terme

Term	Energie	Impuls	schematische Darstellung	phys. Prozess
$\vec{A}_+ \vec{A}_-$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		Absorption $\Delta E \approx 2\hbar\omega$
$\vec{A}_+^* \vec{A}_+^*$	$E \rightarrow E + \omega_+ + \omega_-$	$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		
$\vec{A}_-^* \vec{A}_-^*$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		
$\vec{A}_-^* \vec{A}_+^*$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		Emission $\Delta E \approx -2\hbar\omega$
$\vec{A}_+ \vec{A}_-$	$E \rightarrow E - \omega_+ - \omega_-$	$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		
$\vec{A}_- \vec{A}_+$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		
$\vec{A}_- \vec{A}_+$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		Reflexion $\Delta E \approx 0$ $ \Delta k \approx 2k$
$\vec{A}_+^* \vec{A}_-$	$E \rightarrow E + \omega_+ - \omega_-$	$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		
$\vec{A}_-^* \vec{A}_+$		$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		Transmission $\Delta E \approx 0$ $\Delta k \approx 0$
$\vec{A}_+ \vec{A}_-^*$	$E \rightarrow E + \omega_+ - \omega_-$	$\vec{U}_+ = \vec{U}_+ + \vec{k}_+ + \vec{k}_-$		

Aus dieser physikalischen Diskussion des $(\vec{A})^2$ -Termes schließen wir, daß zwar in tiefster Ordnung bezüglich $\vec{A}$ ein Zusammenhang besteht zwischen einer Zweiphotonenabsorption und -emission, sowie den Reflexions- und Transmissionseigenschaften, jedoch keiner mit der für die Photoemission wichtigen Einphotonenabsorption. Dies gilt selbstverständlich nur in tiefster Ordnung Störungstheorie; aber höhere Terme werden i.a. sicher eine geringere Rolle spielen.

d) Vergleich mit anderen Theorien

In dieser Arbeit wurde vorallem Wert darauf gelegt, die Grundlagen der Theorie der Photoemission so gut wie möglich klar zu legen. Die hier dargestellte Theorie läßt sich sicher ohne große Schwierigkeiten mathematisch sauber durchführen. Es wurde in Hinblick darauf besonders darauf geachtet, daß der formale Rahmen konsequent eingehalten wurde. Insbesondere behandelten wir nicht wie etwa in der grundlegenden Arbeit von Adawi [1964] das Strahlungsfeld in zweiter Quantisierung, die übrigen Größen jedoch im üblichen Formalismus der Quantenmechanik.

Die auf die Arbeit von Adawi aufbauende Theorie von Mahan [1970] ist in mancher Beziehung recht unklar, da die Rechnungen bei Mahan unvollständig sind und scheinbar teilweise ohne irgend eine theoretische Begründung hingeschrieben wurden.

Besonders hervorzuheben ist die Arbeit von Schaich [1971], in der der Responseformalismus verwendet wurde. Schaich geht auch auf die Frage der Äquivalenz von Response- und Streutheorie ein und leitet einzelne Ergebnisse von Mahan her. Allerdings handelt es sich dabei um Einteilchennäherungen für sehr spezielle Potentiale, während wir einen allgemeinen Zusammenhang von Response- und Streutheorie bewiesen.

7. Schlußbemerkungen

Die hier entwickelte Theorie zeigt, daß Response- und Streutheorie äquivalent sind, unabhängig vom speziellen Modell. Durch Diskussion des im äußeren Feld quadratischen Anteils der Wechselwirkung $H^{\text{ext}}(t)$ konnte auf einfache Art und Weise gezeigt werden, in welchem Verhältnis die optischen Prozesse Transmission und Reflexion, Absorption und Emission von $2\omega_k$ und die Photoemission zueinander stehen.

Der Zugang zur zeitunabhängigen Streutheorie wie er hier durchgeführt wurde, erlaubte es, geschlossene Ausdrücke von der Form einer verallgemeinerten L-S-Gleichung anzugeben. Dies wäre mit Hilfe der sonst üblichen Methoden nicht möglich gewesen.

Natürlich konnten viele verschiedene interessante Fragestellungen im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt werden, wie etwa die analytischen Eigenschaften der Streuamplituden bei zeitlich variablem Potential.

Besonders wünschenswert wäre auch eine möglichst genaue Untersuchung der Möglichkeiten, die die Messung der Mehrteilchenemission bietet. Es ist jedoch klar, daß, um zu einem besseren Verständnis dieser Phänomene gelangen zu können, zuerst realistische Berechnungen der Einteilchennäherungen nötig sind. Auf diesem Gebiete zeichnen sich jedoch bereits vielversprechende Erfolge ab (Feuerbacher et al. [1976]). In diesem Zusammenhang sind auch viele Fragen experimentell noch ungeklärt, die etwa mit der Winkelverteilung (in δ und ψ) der Photoelektronen zusammenhängen: treten Interferenzerscheinungen ähnlich wie bei LEED-experimenten auf oder nicht?

Inwiefern die gemessenen Kurven direkten Aufschluß über die Bandstruktur der Festkörper liefern, kann sicher nicht allgemein beantwortet werden. Hierzu benötigt man vielmehr bestimmte Modelluntersuchungen, bei denen die Photoelektronen und die Bandstrukturen mit den selben Methoden berechnet werden. Denn nur in diesem Falle könnte man von einem konsistenten Modell sprechen. Sicher ist es sinnlos mit viel Aufwand Bandstrukturen zu berechnen und

sie mit Photoemissionsmessungen quantitativ vergleichen zu wollen, ohne daß man dabei auch die optischen Matrixelemente berechnet. Hier erweisen sich im Moment numerische Berechnungen mit LEED-ähnlichen Methoden als besonders vielversprechend. Diese Probleme sind Gegenstand weiterer Untersuchungen und es wird sich erst noch zeigen müssen, ob die experimentellen Spektren sich tatsächlich mit Hilfe einfacher Regeln, ähnlich wie beim Drei-Stufen-Modell, quantitativ erklären lassen werden, welchen Einfluß die Oberfläche und eventuell ein lokales elektromagnetisches Feld haben werden.

Appendix A

Wir wollen in diesem Appendix die Methode skizzieren, mit der man in der Streutheorie oft die Existenz der Mølleroperatoren beweist (Simon [1971], Taylor [1972]).

Wir hatten gefordert, daß

$$(A1) \quad |V(\cdot, t)| \leq C < \infty$$

ist, und

$$(A2) \quad \int d^3x_{n_2} V_{ij}(\vec{x}_{n_2}, t) V_{ij}(\vec{x}_{n_2}, t)^* < \infty$$

Wir hatten dann als Existenzkriterium im Falle zeitlich variabler Potentiale die Bedingung

$$(A3) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} ds \|V_\alpha(s) U_\alpha(s) \chi_\alpha\| < \infty$$

angegeben.

Tritt nun etwa der Fall ein, daß

$$(A4) \quad V_\alpha(t) \neq 0 \quad \text{nur für } t \in [-T_1, T_2] \text{ mit } 0 \leq T_1, T_2 \leq \infty$$

d.h. daß das Potential nur während einer beschränkten Zeit von Null verschieden ist, dann könnte man sofort eine obere Schranke für das Integral (A3) angeben:

$$(A5) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} ds \|V_\alpha(s) \chi_\alpha(s)\| \leq |T_1 - T_2| \|V_\alpha(\tau) \chi_\alpha(\tau)\| \quad ; \quad \tau \in [-T_1, T_2]$$

Allgemeiner kann man den Zustand χ_α von der Form

$$(A6) \quad \chi_\alpha(+\infty; \vec{x}_{cm}, \vec{x}_{rel}) = \varphi_{k_0}(\vec{x}_{cm}; t) \otimes \varphi_\alpha(\vec{x}_{rel}; t)$$

wählen, wobei k_0 die Schwerpunktbewegung beschreibt, die durch ein Gaußpaket beschrieben werden kann. Nun gilt aber

$$(A7) \quad U_\alpha(t) \chi_\alpha(\vec{x}_{cm}; \vec{x}_{rel}) = \varphi_{k_0}(\vec{x}_{cm}; t) \otimes e^{-iE_0 t} \varphi_\alpha(\vec{x}_{rel}; E_\alpha)$$

und $\mathcal{G}_{k_0}(t)$ stellt ein zerfließendes Gaußpaket dar, für das gilt:

$$(A8) \quad \|\mathcal{G}_{k_0}(t)\| \in C_3 \quad t^{-3/2}$$

Somit gilt auch

$$(A9) \quad \int_{-\infty}^{t_0} ds \quad \bar{s}^{3/2} < \infty$$

(dass das Ortsintegral endlich ist, folgt aus der Vor.(A2),

wie von J.M.Cook in Journal Math.Phys. 36,82(1957) gezeigt

wurde; vergl. Simon[1971])

Appendix B

Da wir nur reine Zustände betrachtet haben, in vielen Fällen jedoch Gemische betrachtet werden müssen, wollen wir die Streutheorie auf diesen Fall verallgemeinern. Dies ist nicht besonders schwierig, denn ein Gemisch läßt sich darstellen als eine Linearkombination von reinen Zuständen. Wir können jedoch in diesem Falle den Streukanal nicht mehr charakterisieren durch eine bestimmte Energie, sondern im einfachsten Fall wegen

$$(B1) \quad \rho = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n| ; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} ; \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

durch eine bestimmte Temperatur T und einen bestimmten Kanalhamiltonoperator H für den gilt:

$$(B2) \quad H |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Die Dichtematrix erfüllt allgemein die Heisenberggleichung

$$(B3) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \rho_s(t) = [(H_V + H^{out}(t)), \rho_s(t)] \quad (t=1)$$

Wir können ihr asymptotisches Verhalten für $t \rightarrow \pm\infty$ mit dem eines freien Systems H_{out} resp. H_{in} bzw. dessen Dichtematrix ρ_{out} resp. ρ_{in} vergleichen, indem wir fordern, daß sich $\rho_s(t)$ in diesen limites kaum mehr von ρ_{in} resp. ρ_{out} unterscheiden, d.h.

$$(B4) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| \rho_s(t) - \rho_{s,out}(t) \| = 0$$

Wegen

$$(B5) \quad \rho_s(t) = U_s(t,0) \rho_s(0) U_s^\dagger(t,0)$$

und

$$(B6) \quad \rho_{s,out}(t) = U_{out}(t) \rho_{s,out}(0) U_{out}^\dagger(t)$$

folgt somit, daß wegen

$$\begin{aligned} (B7) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \| U(t,0) [\rho_s(0) - \tilde{U}^\dagger(t,0) U_{out}(t) \rho_{out} U_{out}^\dagger(t) \tilde{U}(t,0)] \| \\ = \lim_{t \rightarrow +\infty} \| \rho_s(0) - [\tilde{U}^\dagger(t,0) U_{out}(t)] \rho_{out} [\tilde{U}^\dagger(t,0) U_{out}(t)]^\dagger \| = 0 \end{aligned}$$

das Problem der Asymptotik für $\rho(t)$ auf jenes für reine Zustände (Existenz von $\Omega_{\alpha\pm}(t)$) zurückgeführt ist.

Da die Energie hier nicht mehr zu einer Klassifikation der Kanäle benutzt werden kann, erweist sich die Definition des Fragmentkanals, der durch einen Operator H_{α} definiert wurde, in diesem Falle als sinnvoll.

Appendix C

Die Äquivalenz von Response- und Streutheorie läßt sich für Gemische, genau wie die Streutheorie für Gemische, auf den Fall für reine Zustände reduzieren.

Ein möglicher und oft benutzter Zugang zur Responsetheorie verwendet als Ausgangspunkt die Bewegungsgleichung der Dichtematrix bei Anwesenheit einer externen Störung:

$$(C1) \quad i \frac{\partial}{\partial t} \rho_s(t) = [(H_0 + H^{ext}(t)), \rho_s(t)]_- \quad (k=1)$$

Man löst dann diese Gleichung bis zur gewünschten Ordnung in $H^{ext}(t)$. Man erhält dann für die uns hier speziell interessierende quadratische Response im Falle der Photoemission (falls wir nur den Absorptionsterm mitnehmen).

$$\begin{aligned} (C2) \quad \langle \hat{J}_A(\vec{R}, t) \rangle^{(2)} &= \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \mathcal{T}_n \bar{e}^{iE_n s_1} \frac{1}{2} \langle u | H_{+I}^{ext(1)*}(s_1) \hat{J}_A(\vec{R}, t) H_{+I}^{ext(1)}(s_2) | u \rangle \\ &= \mathcal{T}_n \frac{1}{2} \bar{e}^{iE_n t} \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^t ds_2 \langle u | e^{iE_n s_1} H_{+I}^{ext(1)*} e^{i\omega s_1} e^{-iH_0 s_1} \hat{J}_A(\vec{R}, t) e^{iH_0 s_2} H_{+I}^{ext(1)} e^{iE_n s_2 - i\omega s_2} | u \rangle e \end{aligned}$$

Die Integrale lassen sich somit genau wie im Falle reiner Zustände ausführen und wir erhalten als Ergebnis:

$$(C3) \quad \langle \hat{J}_A(\vec{R}, t) \rangle = \mathcal{T}_n \frac{1}{2} \bar{e}^{iE_n t} \langle u | H_{+I}^{ext(1)*} G_{20}(E_n + \omega) \hat{J}_A(\vec{R}) G_{01}(E_n + \omega) H_{+I}^{ext(1)} | u \rangle$$

wie in Gleichung (6.31), mit dem Unterschied, daß wir hier ein statistisches Mittel über die Streukanäle mit der in-Konfiguration haben, die sich durch H_V beschreiben lassen.

Literaturverzeichnis

- Adawi [1964] : Phys. Rev. 134, A788
- Amusia [1975] : Case Studies in Atomic Physics 5, 47-179
- Born [1972] : Optik, Springer Verlag, Berlin, N.Y.
- Caroli et al. [1973] : Phys. Rev. B8, 4552
- Duke et al. [1972] : Phys. Rev. B5, 2436-2462
- Ehrenreich [1966] : in: Optical Properties of Solids
ed. J. Taue, Academic Press N.Y.
(Fermi-Lectures)
- Fetter-Walecka [1971] : Quantum Theory of Many-Particle Systems
McGraw-Hill N.Y.
- Feuerbacher et al. [1976] : Proc. of an Int. Symp. on Photoem.
european space agency, Paris
- Hedin-Lungquist [1969] : Solid State Physics 23, 1-181
- Hermeking [1972] : Z. f. Physik 253, 379-390
- J.M. Jauch [1958] : Helv. Phys. Acta 31, 127-158, 661-684
- [1968] : Foundations of Quantum Mechanics
Addison-Wesley Publ. Comp. London
- Kato [1953] : J. Math. Soc. Japan 5, 208-234
- [1966] : Perturbation Theory for linear Operators
Springer Verlag, Berlin, N.Y.
- Mahan [1970] : Phys. Rev. B2, 4334
- Pendry [1976] : Surf. Sci. 57, 679
- Peuckert [1971] : Z. f. Physik 241, 191-204
- Prosser [1964] : J. Math. Phys. 5, 708
- Reed-Simon [1975] : Methods of Modern Mathematical Physics
Bd. 2, Academic Press N.Y.

- Schaich [1971] : Phys. Rev. B3, 2452
- Simon [1971] : Quantum Mechanics for Hamiltonians
Defined as Quadratic Forms
Princeton Series in Physics
Princeton University Press, New Jersey
- [1977] : Comm. Math. Phys. 53, 151-153
- Taylor [1972] : Scattering Theory
J. Wiley + Sons Inc., N.Y.
- Wendin [1975] : The Random Phase Approximation with
Exchange, preprint
- Yoshida [1965] : Functional Analysis
Springer Verlag, Berlin, N.Y.

Lebenslauf

- 1949 geb. 22.4., in Laupen, Schweiz
- 1956 Primarschule in Laupen
- 1960 Sekundarschule in Laupen
- 1964 math.nat. Gymnasium in Schwyz (Internat)
- 1969 Matura Typus C (math.nat. Richtung)
- WS 1969 Studium der Mathematik und Physik an der Eidgenössischen Technischen Hochschule (ETH) in Zürich
- 1973 mündliche Diplomprüfungen
- WS 1973 schriftliche Diplomarbeit bei Prof. Dr. Baltensberger 'Dissipations- und Relaxationserscheinungen in der Photoemission'
- 1974 ab SS 1974, Assistent am Institut für Theoretische Physik der ETH Zürich
30. Sept. - 12. Okt., International School of Mathematical Physics, Camerino (Italien)
1. Nov., Ruhr-Universität Bochum, wiss. Hilfskraft und Beginn der Dissertation am Lehrstuhl für Theor. Phys. III von Prof. Dr. D. Wagner
- 1975 25. - 29. Aug., IUPAP International Conference on Statistical Physics, Budapest (Ungarn)
- ab SS 1977 Gastaufenthalte bei Nordita Kopenhagen (Dänemark), Chalmers Institute of Technology Göteborg (Schweden) und am International Center for Theoretical Physics Trieste (Italien)
- SS 1978 abschliessende Überarbeitung und Beendigung der Dissertation
- WS 1978 anschliessend Tätigkeit als wiss. Assistent im Fachbereich für Mathematik, Lehrbereich Informatik, der Fernuniversität, Gesamthochschule Hagen bei Prof. Dr. W. Schneeweiss

